548
П83

АКАДЕМИЯ НАУК СССР

М. М. ПРОТОДЬЯКОНОВ · И. Л. ГЕРЛОВИН

ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ И ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ

ИЗДАТЕЛЬСТВО ·НАУКА·

АКАДЕМИЯ НАУК СССР
ОРДЕНА ЛЕНИНА ИНСТИТУТ ФИЗИКИ ЗЕМЛИ
им. О. Ю. ШМИДТА
Сектор физико-технических горных проблем

М. М. ПРОТОДЬЯКОНОВ, И. Л. ГЕРЛОВИН

ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ И ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ

ИЗДАТЕЛЬСТВО «НАУКА»
МОСКВА 1975

УДК 548.0:549.903+530.1+539.1

Электронное строение и физические свойства кристаллов. Протодьяконов М. М., Герловин И. Л. Изд-во «Наука», 1975, 1—356.
Книга является результатом многолетней как самостоятельной, так и совместной работы авторов. В ней рассматриваются свойства кристаллов под углом зрения единства физических и структурных свойств кристаллов, молекул, атомов и элементарных частиц. Установление этого единства укрепляет известные представления и позволяет существенно их расширить.
Монография рассчитана на широкий круг исследователей и практиков кристаллографов, физиков, геологов, химиков и специалистов в других областях теоретических и прикладных наук, связанных с физикой микромира.
Таблиц 30, иллюстраций 136, библиограф. 248 назв.

П $\frac{20805\text{-}452}{055(02)\text{-}75}$ 279-75

© Издательство «Наука», 1975 г.

ПРЕДИСЛОВИЕ

Первая монография на близкую тему вышла в свет в издательстве «Наука» в 1965 г. под названием: «Свойства породообразующих минералов и их электронное строение». Второе дополненное издание книги было опубликовано в том же издательстве в 1969 г. («Свойства и электронное строение породообразующих минералов»). Настоящая монография не повторяет прежнего материала, а существенно развивает и дополняет его.

В первых изданиях основанием работы было исследование электронного строения атомов, молекул и кристаллов, выполненное нами на основе геометрического анализа и некоторых достаточно общих законов симметрии. В настоящем издании строение электронных оболочек атомов рассматривается на основе физической теории, позволяющей описать и рассчитать свойства электронов и других элементарных частиц. В качестве такой теории выбрана Теория фундаментального поля (ТФП) [1]. Поэтому мы воспользовались согласием автора ТФП И. Л. Герловина написать первый раздел монографии. Физические аспекты других разделов рассматривались также при его деятельном участии.

Во втором разделе излагаются следствия из ТФП, относящиеся к строению и свойствам ядер атомов. Существенно развит вопрос об электронном строении атомов; при этом показано, что использование гибридизированных волновых функций приводит к формам электронных оболочек атомов, которые ранее были получены нами только на основе соображений симметрии и применения принципа минимальной экранировки. Обоснование правомерности использования таких решений уравнения Шредингера получено на основе ТФП.

При изложении вопроса об электронном строении кристаллов удалось показать, что основные кристаллические структуры тесно связаны с конусами анизотропии элементарных частиц, рассмотренными в первом разделе. Заметно увеличено число проанализированных полиморфных модификаций кристаллов, куда кроме минералов включены также некоторые элементы. Впечатляющим результатом этих глав является поразительное совпадение углов некоторых характерных направлений в кристаллах относительно осей симметрии с углами конусов анизотропии элементарных частиц, полученными в ТФП теоретически.

Публикуемые в монографии материалы могут оказать существенную помощь в истолковании различных опытных данных, а также в теоретических и экспериментальных исследованиях, в которых большую роль играют сведения о свойствах атомов, молекул и кристаллов. Мы полагаем, что книга будет иметь не только теоретическое, но и прикладное значение для ученых

---

[1] *И. Л. Герловин.* Основы единой релятивистской квантовой теории фундаментального поля (ТФП). № 7084 — 73 деп. (Монография, депонированная ГАО АН СССР в 1973 г.).

и инженеров различных специальностей, нуждающихся в данных о строении атомов и кристаллов. В отличие от предыдущих изданий она рассчитана на широкий круг читателей — специалистов в различных научных и инженерно-прикладных областях: минералогии и геологии, физики, химии, кристаллографии, материаловедении и др. При написании книги, охватывающей столь широкий круг вопросов — от кристаллов до элементарных частиц, перед авторами встала трудная задача — совместить полноту изложения и обстоятельность в рамках одной книги. Трудность усугубилась еще и тем, что книга адресуется специалистам разного профиля, при этом материал должен быть интересен для специалистов в данной области и в то же время понятен неспециалистам. Конечно, можно было бы искусственно разбить монографию на ряд работ, каждая из которых была бы предназначена лишь узким специалистам. Однако авторы убеждены в том, что такое искусственное разделение темы неоправданно. В природе не действуют чисто «математические», «химические» или «кристаллографические» законы, ей узки эти рамки. Авторы выражают надежду, что монография явится серьезным аргументом в пользу этого глубоко диалектического тезиса.

Но самой большой трудностью было рассмотрение упомянутых проблем не только под одним углом зрения, но и на основе новой теории—ТФП, которая самым непривычным для многих читателей образом расширяет и углубляет основные понятия квантовой теории так, что ликвидируется искусственно возведенная пропасть между «чисто» классическими и «чисто» квантовыми понятиями.

Предложенная вниманию читателя книга, конечно, не может служить образцом решения указанных трудных задач, но авторы хотели бы рассчитывать на понимание тех читателей, которым ясен характер этих трудностей.

В процессе многолетней разработки рассматриваемой здесь теории единства физических и структурных свойств элементарных частиц, атомов, молекул и кристаллов авторы провели большое количество дискуссий, участникам которых выражают благодарность.

Заслуженный деятель науки и техники РСФСР
проф. *М. М. Протодьяконов*

I. ЭЛЕМЕНТАРНЫЕ ЧАСТИЦЫ И ИХ РОЛЬ В ФОРМИРОВАНИИ СТРУКТУРЫ АТОМОВ

Глава 1
СОСТОЯНИЕ ВОПРОСА

Квантовая механика только поставила вопрос о строении электронных оболочек атомов, но не решила его. В значительной мере это связано с тем, что не были учтены особенности структуры и взаимодействия составляющих атом элементарных частиц: электрона, протона и нейтрона, без чего невозможно построение законченной и последовательной теории атома, в частности, потому, что электрическое поле заряженных частиц в нем не обладает сферической симметрией, а имеет место анизотропия в структуре силового поля. Анизотропия этого поля оказывается ответственной за многие кардинальные свойства атома.

В этом разделе рассматриваются такие свойства элементарных частиц, знание которых необходимо для выяснения роли этих свойств в формировании атомов и простейших атомных структур.

Экспериментальные данные

В табл. 1 приведены основные экспериментальные данные об элементарных частицах, заимствованные нами из обзора [1]. Сейчас известно уже более 300 «элементарных частиц». Мы взяли эти слова в кавычки, чтобы подчеркнуть их явную условность, очевидную из того факта, что этих частиц мы уже знаем столь много. Только три из них: протон, нейтрон и электрон — входят, по установившимся сейчас представлениям, в состав атома. Протоны и нейтроны рассматриваются как одна частица — нуклон, которая проявляет себя то как протон, то как нейтрон, но так, что ядро в целом представляет собой систему из неменяющегося числа протонов и нейтронов.

Оболочки атомов состоят только из электронов. Предполагается, что свойства электрона, входящего в атом, не меняются по сравнению со свойствами свободного электрона.

При неупругом ударе частиц, обладающих энергией, заметно превышающей собственную энергию протона, равную $m_p c^2$, в результате ядерных реакций «рождаются» другие частицы. Экспериментально элементарные частицы (см. табл. 1) были получены при столкновении ядер с высокоэнергетическими частицами космических лучей или частицами, разогнанными в ускорителях заряженных частиц. Например, ускоритель заряженных частиц в Институте физики высоких энергий АН СССР разгоняет протоны до энергий, превышающих mc^2 в 75 раз. Главное внимание мы уделим основным частицам, составляющим атом: протонам, нейтронам, электронам.

Экспериментально обнаружены и измерены многие свойства частиц. С точностью до четвертого—шестого знака измерены массы, с большой точностью определены магнитные моменты.

Таблица 1

Основные свойства элементарных частиц

Стабильные частицы			Барионы			
обозначение	m, в m_e *	μ, в $\frac{\hbar}{2mc}$	обозначение	m, в m_e	обозначение	m, в m_e
γ	0		N (939)	1838	Δ (1950)	3775—3875
ν (ν_e, ν_μ)	0		N' (1470)	2740—2877	Δ (1960)	3835
$e^\pm$	1,00000	1,0011597	N' (1520)	2955—3015	Δ (2160)	4225
$\mu^\pm$	206,76864(125)	1,001166	N' (1535)	2935—3130	Δ (2420)	4540—4795
$\pi^\pm$	273,1269(133)		N' (1670)	3270—3295	Δ (2850)	5575
π^0	264,1166(152)		N' (1688)	3290—3305	Δ (3230)	6320
$K^\pm$	966,152(75)		N''(1700)	3260—3455	Z 0(1780)	3485
K^0	973,97(25)		N (1700)	3325	Z 0(1865)	3650
K_s^0			N'' (1780)	3230—3640	Z 1(1900)	3720
K_L^0			N (1810)	3464—3640	Z 1(2150)	4205
η^0	1074,0(10)		N (1990)	3895	Z 1(2500)	4890
$p^\pm$	1836,1513(103)	2,79280	N (2000)	3914	Λ (1116)	2184
n^0, $\tilde{n}^0$	1838,6826(104)	—1,9131	N (2040)	3990	Λ (1330)	2605
Λ^0	2183,16(10)	—0,80(7)	N (2100)	4110	Λ'(1405)	2749(10)
Σ^+	2327,52(12)	3,38(58)	N (2100)	4110	Λ'(1520)	2971(4)
Σ^0	2333,60(17)		N (2190)	3915—4425	Λ''(1670)	3249—3288
Σ^-	2343,14(12)		N (2220)	4305—4395	Λ''(1690)	3307(20)
Ξ^0	2573,2(12)		N (2650)	5185	Λ (1750)	3425
Ξ^-	2585,68(28)	2,72(106)	N (3030)	5930	Λ' (1815)	3562(10)
Ω^-	3272,4(8)		N (3245)	6350	Λ'(1830)	3540—3600
			N (3690)	7220	Λ (1860)	3640
			N (3755)	7350	Λ (1870)	3660
			Δ' (1232)	2407—2419	Λ (2010)	3935
			Δ (1650)	3160—3315	Λ (2020)	3955
			Δ (1670)	3230—3365	Λ (2100)	4090—4149
			Δ (1690)	3305	Λ (2110)	4130
			Δ (1890)	3600—3755	Λ (2350)	4600
			Δ (1900)	3718	Λ (2585)	5060
			Δ (1910)	3485—3785	Σ (1385)	2706,2

Барионы		Мезоны			
обозначение	m, в m_e *	обозначение	m, в m_e *	обозначение	m, в m_e *
Σ (1440)	2820	ε^0	1370	X (1430)	2800
Σ (1480)	2895	ρ (770)	1507(9)	X (1440)	2820
Σ (1670)	3268 (20)	ω^0 (783)	1531,7(12)	f' (1514)	2967
Σ (1690)	3305	K^* (892)	1746,0(10)	F_1 (1540)	3014
Σ''(1750)	3325—3505	M (940)	1840	ρ' (1600)	3131

Таблица 1 (окончание)

Барионы		Мезоны			
обозначение	m, в m_e*	обозначение	m, в m_e*	обозначение	m, в m_e*
Σ (1765)	3454(10)	M (953)	1865	A_3 (1640)	3209
Σ (1840)	3600	η^0 (958)	1874,0(6)	K_N (1660)	3250
Σ (1880)	3680	δ (970)	1910(20)	ω^0 (1675)	3260(20)
Σ (1915)	3720—3775	H (990)	1935	g (1680)	3299(40)
Σ'' (1940)	3650—3816	S' (993)	1943(10)	X (1690)	3305
Σ (2000)	3915	φ^0 (1019)	1995,5(6)	K_N (1760)	3445
Σ (2030)	3953—3992	M (1033)	2020	$L^{\pm}$ (1770)	3454(20)
Σ (2070)	4050	B_1 (1040)	2035	X (1795)	3515
Σ (2080)	4070	η_N (1080)	2115		
Σ (2100)	4110	A_1 (1100)	2151		
Σ (2250)	4393—4462	M (1150)	2250	K_N (1850)	3620
Σ (2455)	4805	$A_{1,5}$ (1170)	2290	S (1930)	3775
Σ (2620)	5125			ρ (2100)	4110
Σ (3000)	5870	k	2350—2740	T (2200)	4305
	2997,6(6)				
Ξ (1530)	3004,1(14)	B (1235)	2421(19)	K^* (2200)	4305
Ξ (1630)	3190	K_A(1240)	2431	ρ (2275)	4450
Ξ (1820)	3515—3660	ρ (1250)	2446	$N\overline{N}$ (2375)	4650
Ξ (1940)	3757—3835	F^0 (1270)	2485(20)	X (2500)	4890—7045
Ξ (2030)	3975	K_A (1280)	2505—2740	K^* (2800)	5480
Ξ (2250)	4405	D^0 (1285)	2517(19)		
Ξ (2500)	4890	A_2 (1310)	2564(19)		
		F (1420)	2771(20)		
		K^*(1420)	2779(10)		

* m_e — масса электрона.

С хорошей точностью измерено время жизни частиц. Спины и заряды частиц определяются с меньшей точностью, так как, согласно большинству общепринятых теорий, спин должен быть кратным $^1/_2$ или 1, а заряд всегда является кратным заряду электрона. Последнее известно из эксперимента, но поскольку отклонений от этого опытного факта зарегистрировано не было, то, как правило, экспериментаторы и не стремятся к увеличению точности измерения величины заряда каждой частицы. Эксперимент кроме перечисленных характеристик позволяет оценить значение специфических квантовых величин, которые не учитываются в неквантовых теориях: изотопический спин, пространственную, временную и зарядовую четности, «джи»-четность и странность. Присвоение частицам этих свойств оказалось необходимым для приобретения возможности оценивать их поведение в различных процессах с помощью созданных для этой цели квантовых теорий. Подробно эти квантовые числа рассмотрены в работах [2—5].

Опыт показал, что взаимодействие частиц бывает четырех видов: сильное, электромагнитное, слабое и гравитационное. Сильное ответственно за ядер-

ные силы и определяет, в частности, связь одноименно заряженных протонов и нейтральных нейтронов в ядре. Оно характеризуется константой взаимодействия α_2, имеющей порядок 0,1—10 безразмерных величин.

Электромагнитное взаимодействие характеризует поведение заряженных частиц и частиц, не имеющих заряда, но почему-то обладающих магнитным моментом (например, нейтрон). Оно характеризуется безразмерной константой $\alpha = 7{,}29732 \cdot 10^{-3}$.

Слабое взаимодействие ответственно за реакции распада частиц и характеризуется безразмерной константой α_1, имеющей порядок 10^{-14}.

Гравитационное взаимодействие на атомных и ядерных расстояниях, т. е. на расстояниях порядка 10^{-8} и 10^{-13} *см*, считается практически несущественным и оценивается безразмерной константой, которая примерно на 40 порядков меньше константы сильного взаимодействия. Экспериментально определяется размерная гравитационная постоянная $G = 6{,}6734 \cdot 10^{-8}$ *см*^{3}/*г*·*сек*^{2}.

Таковы основные опытные данные, характеризующие элементарные частицы.

Эксперимент ставит перед теорией следующие кардинальные вопросы.

1. Почему существует только 4 резко различающихся по величине взаимодействия.

2. Какова физическая природа этих взаимодействий.

3. Каков способ расчета всех количественных и качественных характеристик каждого из четырех основных взаимодействий.

4. Почему при взаимодействиях могут «рождаться» и «уничтожаться» — аннигилировать — многие частицы. Как они возникают из «пустого» вакуума и куда исчезают, порождая только фотоны в нем.

5. Почему частицы образуют не непрерывные, а дискретные ряды.

6. Почему параметры, характеризующие частицы, строго постоянны и для каждой частицы имеют свое определенное и сохраняющееся значение.

7. Почему у всех заряженных частиц один и тот же заряд, несмотря на то что массы их существенно различаются. Закон сохранения заряда не требует постоянства этой величины, но требует его сохранения.

8. Как систематизировать такое большое количество элементарных частиц. Есть ли способ единой систематизации частиц всех видов (адронов и лептонов).

8. Каков метод теоретического расчета всех параметров частиц.

В настоящее время общепринятой теории элементарных частиц еще нет, и, следовательно, нет полных и согласованных ответов на перечисленные вопросы. На некоторые из них до последних лет не было вообще никакого ответа.

Таковы трудности в собственной теории элементарных частиц. Поскольку ЭЧ являются «кирпичиками мироздания», эти трудности мешают развитию тех наук, в которых теория микромира играет определяющую роль (атомная физика, физика кристаллов, твердого тела и т. п.). Ясно, что в каждой из этих наук эксперимент ставит перед теорией множество вопросов, остающихся многие годы без ответа.

Подробный обзор всех многочисленных попыток получить ответ на упомянутые и им подобные вопросы выходит за рамки этой работы. Здесь мы ограничимся изложением основ теории, которая значительно полнее удовлетворяет эксперименту по сравнению с другими теориями [6—12].

Глава 2

ОСНОВЫ ТЕОРИИ

В основе единой релятивистской квантовой теории фундаментального поля (ТФП) лежит новое представление о том, как пространство — время — вещество образуют триединство [6—12]. Когда частица и античастица вступают в реакцию, то они аннигилируют — исчезают, как обычно полагают, в ... пустое пространство, а пустое пространство в определенных условиях может породить пару античастиц. Так считается в полностью ортодоксальных теориях.

В ТФП аннигиляция пары античастиц есть не что иное, как образование Элементарной Частицы Вакуума (ЭЧВ), которая в момент образования ушла за границу «черной дыры» нашего макропространства, вследствие чего мы лишились возможности получить какую-либо информацию о ней. Но из этого вовсе не следует, что частицы бесследно исчезли. Совсем наоборот, образование новой частицы вакуума, который и так ими плотно заполнен, вызывает в нем возмущение, которое мы регистрируем в виде двух гамма-квантов, образовавшихся при аннигиляции частиц.

Таким образом, в ТФП учитывается тот факт, что Космос нельзя считать пустым пространством. Он заполнен материальной субстанцией, которую в настоящее время называют «физическим вакуумом» (далее — просто вакуум). Бытовавшее в XIX в. слово «эфир» ныне не употребляется, так как твердо установлено, что механического эфира, рассматриваемого как неподвижная среда, в природе нет.

Материальная субстанция вакуум играет важную роль во многих физических явлениях. Например, вакуум изменяет магнитный момент электрона так, что он вместо одного магнетона Бора становится равным 1,00116 магнетона, т. е. увеличивается на 0,1%. Такого же порядка вакуумные поправки известны в спектрометрии. Эти достоверные экспериментальные факты хорошо согласуются с теоретическими расчетами методами квантовой электродинамики (КЭД). Однако КЭД не получает доказательств существования вакуума из законов теории, а постулирует его. Понятно поэтому, что все свойства вакуума остаются в рамках КЭД далеко не выясненными. Невозможно извлечь информацию о вакууме также из других широко известных физических теорий. Так, специальная теория относительности (СТО) принципиально не содержит понятия вакуума, рассматривая пространство идеально пустым. Сохраняется представление о пустом пространстве и в общей теории относительности (ОТО). Нет понятия вакуума и в нерелятивистских квантовых теориях. Существование его учитывается только в релятивистских квантовых теориях, т. е. в теориях частиц, обладающих высокими энергиями, и поэтому связанных со СТО.

Так возникло в теоретической физике глубокое внутреннее противоречие. В нерелятивистских теориях нет понятия о вакууме. В теориях, опирающихся на СТО и ОТО, оно есть, хотя сами релятивистские теории в основе своей не допускают существования в пустом пространстве какой-либо материальной субстанции. Поэтому развитие теории вакуума практически приостановилось. Это затрудняет решение многих вопросов физики, особенно теории элементарных частиц.

Понятно, что главное внимание с самого начала работы над теорией было уделено вопросу о том, каковы реальные свойства окружающего нас «пус-

того» пространства. Уже к началу 50-х годов стало ясно, что удивительный мир «невидимого» физического вакуума исключительно плотно «заселен». Расчет показал, что в 1 $см^3$, например, протон-антипротонного вакуума находится примерно 10^{39} частиц. Такой концентрации мы не знаем в изученной нами атомной материи. Если еще учесть, что известные сейчас материальные формы занимают ничтожную часть объема вселенной, то становится понятным, почему без учета свойств вакуума авторы теорий элементарных частиц испытывают огромные трудности. До сих пор неясно, почему существует дискретный спектр масс частиц, почему одни устойчивы, а другие нет, почему у заряженных частиц один и тот же элементарный заряд, как рассчитать параметры частиц, хорошо известные из опыта, почему существует дискретный ряд основных взаимодействий (сильные, электромагнитные, слабые, гравитационные), как вычислить константы этих взаимодействий и т. д.

Приходится удивляться тому, что ученые, опираясь только на известные нам материальные формы, являющиеся «легкой зыбью» в океане вакуума, смогли вообще понять что-то фундаментальное. Произошло это потому, что титаническим трудом большого числа физиков были угаданы многие свойства вакуума. Эйнштейн «угадал», что пространство и время в окружающем нас мире (т. е. в вакууме) глубоко связаны между собой, а скорость распространения сигнала в нем не зависит от скорости источника, т. е. инвариантна. Эти догадки в виде постулатов были заложены в СТО. Далее тот же Эйнштейн предположил, что в мире должно быть триединство: пространство — время — материя — и в рамках этого триединства, т. е. в рамках единой теории поля, должно все выясниться. Но он так и не успел завершить работу, потратив на нее почти сорок последних лет жизни. Как сейчас стало ясным, ему помешали: а) представление об абсолютно пустом пространстве; б) попытка свести все виды взаимодействия только к кривизне этого пустого пространства (аналогично объяснению гравитационных сил в ОТО); в) отказ от квантовых свойств микромира, которые не могут не отразиться и на свойствах пространства.

Большую часть квантовых свойств вакуума «угадали» также Бор, Шредингер, Борн, де-Бройль, Дирак, Фок, Паули и другие физики, введя в квантовые теории (их сейчас много) ряд недоказанных, т. е. не следующих из известных теорий, принципов-постулатов. Большую часть их Эйнштейн не признавал. Другие физики стремились и стремятся объединить СТО и ОТО с квантовыми теориями. Обычно физические теории строятся на основе безграничного применения всех «угаданных» свойств вакуума. А что если мы узнали не все свойства, и часть найденных свойств имеет ограниченное применение. Тогда привычная методика логически противоречива и неправомерна. Надо понять, как «устроен» вакуум, и найти, а не угадывать, его свойства [6—12].

В ТФП не только ЭЧВ, но и наблюдаемые элементарные частицы (ЭЧ) рассматриваются как «черные дыры», определенные внешние свойства которых наблюдаемы в нашем макропространстве. Частица поэтому представляется (но только в макромире) как точечное бесструктурное образование. Чтобы рассчитать свойства ЭЧ и ЭЧВ, надо найти способ проникнуть внутрь черной дыры и выяснить структуру частиц. В нулевом, весьма грубом приближении последняя была описана в [6]. Эти структуры «видны» только «наблюдателю», «сидящему» внутри какой-либо черной дыры, т. е. в собственных координатах частиц. Таким образом, кроме нашего пространства существует еще пространство черных дыр. В этом и только в этом

пространстве можно описать структуру частиц. Но оказывается и внутри черной дыры, скрывающей структуру ЭЧ и ЭЧВ, есть еще одна черная дыра, которая скрывает структуру «субчастиц», т. е. частиц, движущихся внутри первой черной дыры: эти черные дыры образуют свое подпространство. Таким образом, для полного описания всех свойств ЭЧ и ЭЧВ необходимо и достаточно описать их в трех дополнительных (в математическом смысле) подпространствах: первом — нашем макроскопическом, втором — подпространстве черных дыр, содержащих структуру ЭЧВ и ЭЧ, третьем — подпространстве черных дыр, содержащих структуру субчастиц [6—12].

Таковы основные идеи. Остальное — дело математической техники.

Математический аппарат и физические основы теории

При построении практически всех квантовых теорий используется в основном аппарат линейных операторов. При построении релятивистских теорий СТО и ОТО применяется аппарат неэвклидовых геометрий Минковского и Римана. Объединение этих двух различных по математической природе аппаратов в рамках одной теории — задача чрезвычайно сложная.

Основы ТФП можно записать с помощью следующего математического формализма, который рассматривается как наиболее понятный, но не единственно возможный язык, пригодный для описания теории.

В ТФП идеи об органической связи пространства, времени и материи, заложенные в СТО и ОТО, находят свое развитие. Как известно [13—26], в СТО и ОТО содержатся трудности: а) невозможно понять, почему в континуальном пустом пространстве сигнал распространяется с инвариантной и конечной скоростью; б) связь пространства и времени в СТО и ОТО в достаточной мере однозначна, в то же время связь с материей в СТО не раскрыта, а в ОТО носит частичный (только для гравитационного поля) и неоднозначный характер; в) обе теории претендуют на полное описание свойств пространственно-временного континуума, однако в них нет никаких указаний на все известные виды взаимодействий, кроме гравитационного; г) СТО и ОТО являются чисто классическими теориями и не имеют аксиоматической связи с квантовыми теориями [20—27].

В целях устранения этих недостатков в ТФП используется геометрия не чисто римановых континуальных, а римановых континуально-дискретных пространств. Математический язык, используемый здесь, в отличие от языка СТО и ОТО, позволяет принять во внимание квантовый характер физических объектов уже в стадии начальных аксиом. Упомянем здесь особенности этой геометрии, необходимые для понимания дальнейшего.

В ТФП все пространство в целом — континуальное множество точек W. Однако носителем физических свойств этого пространства, его физическим вакуумом, служит дискретное подмножество M, каждая точка которого является не только геометрической, но и вещественной

$$W = P_i \bigcup M_i; \qquad P_i \bigcap M_i = \varnothing; \qquad i = 1, 2, 3, \tag{1}$$

где P_i — подмножество, дополнительное к M_i.

Индекс i имеет следующий смысл. Описание всего пространства через подпространства P_1 и M_1 может оказаться только необходимым, но недостаточным. Действительно, связность подпространства P_1 нарушается тем, что оно дополняется подпространством M_1. Несмотря на то что M_1 состоит

из точечных, дискретно расположенных элементов, в районе этих точек возможны конечные области, которые являются дополнительными к подпространствам как P_1, так и M_1. Аналогичная ситуация имеет место, например, в ОТО, если рассматриваемый физический объект имеет протяженность, меньшую гравитационного радиуса (коллапс). В этом случае сам объект становится в данном пространстве точечным, а в окрестности объекта возникает некая область, дополнительная к этому пространству, нарушающая его связность и не поддающаяся описанию посредством одного и того же метрического тензора. Для описания этой «сколлапсированной» области пространства в ОТО производится такое переопределение координат, при котором дополнительное пространство описывается уже другим метрическим тензором, т. е. становится другим, хотя по-прежнему римановым, пространством.

Сходное положение наблюдается в ТФП с той (существенной) разницей, что в ней рассматривается не только «черная дыра», но и единое подпространство «черных дыр». Каждое из континуальных подпространств P_i и дискретных M_i «заполняет» все пространство W, но в областях, «занятых» дополнительными подпространствами, надо рассматривать только аналитическое продолжение данного подпространства. Таким образом, в отличие от математического аппарата квантовых теорий, физический принцип «дополнительности» отображен рядами дополнительных одна к другой величин, характеризующих объект в различных подпространствах. Каждый ряд физических величин может быть выражен как в C-числах, так и в q-числах, но одновременное рассмотрение всех характеризующих частицу величин в одном пространстве невозможно. Этот принцип шире дополнительности по Бору.

Если бы мы пользовались не C-, а q-числами, то в аналогичной ситуации говорилось бы, что все параметры, описывающие объект только в одном пространстве, коммутируют между собой. А параметры того же объекта, но описывающие его свойства в разных подпространствах, состоят из наборов (для каждого подпространства своих) величин, полностью не коммутирующих между собой. Правомерность использования C-чисел в ТФП обоснована, во-первых, тем, что только в первом подпространстве квант действия $\hbar_i$, характеризующий величину некоммутативности соответствующих операторов, равен постоянной Планка, а во втором и третьем подпространствах он на много порядков меньше (подробнее см. в [6, 7]). Поэтому процессы, протекающие во втором и третьем подпространствах, могут с большой точностью рассматриваться квазиклассически (малость квантового параметра $\hbar_i$). Во-вторых, ТФП показывает, что случайные явления в микромире обязаны своим существованием флуктуациям в вакууме, а далеко не все процессы ими определяются.

На этом основании в монографии мы будем работать в основном с C-числами.

Математический аппарат допускает существование в пространстве W нескольких взаимно и последовательно ограниченных дополнительных одно к другому подпространств $P_1 \cup M_1$, $P_2 \cup M_2$, $P_3 \cup M_3$, ..., $P_n \cup M_n$. Набор таких подпространств, достаточный для полного описания пространства W, обозначен нами символом $P_i \cup M_i$. Число подпространств, необходимое для полного описания W, определяется одним критерием: последнее из них ($P_n \cup M_n$) должно быть связным. Если прибегнуть опять к аналогии с ОТО, то это означает возможность последовательных «коллапсов» в самой сколлапсированной области пространства.

В [12] указывалось, что в 1960—1970 гг. при формировании ТФП был использован новый математический язык — «дикомплексный формализм». Однако оказалось, что он адекватен континуально-дискретной геометрии в пространствах Эйнштейна. Поскольку этот язык много ближе к достаточно общеизвестным, то уже в [12] обоснование как ранее опубликованных результатов [6—11], так и впервые указанных, было выполнено на этом языке. Здесь мы следуем методу изложения, принятому в [12], но для облегчения понимания основ использования нового математического языка воспользуемся понятием о «комплексном сдвиге», существенном в рассматриваемом языке.

Известно [13], что практически все способы математического описания физических законов инвариантны относительно преобразования, связанного со сдвигом координаты на произвольный, но вещественный вектор. Если же снять указанное ограничение и рассматривать сдвиг на мнимую величину

$$r' \to r \overset{+}{(-)} ia,$$

то такой комплексный сдвиг инвариантен по отношению к преобразованию Лоренца, а также при применении оператора Лапласа $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ или оператора Даламбера $\square = \Delta - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}$, но при этом существенным образом деформируется пространственно-временная структура данного физического объекта.

В ТФП комплексный сдвиг рассматривается не как формальный математический прием [1], а как способ отображения (в некоторых случаях конформного) из одного действительного риманова подпространства в другое, тоже действительное, но дополнительное к нему подпространство. Делается это, например, так: подвергнув комплексную координату $(z \overset{+}{(-)} ia)$ еще операции сдвига на комплексную величину $(R \overset{-}{(+)} ia)$, получим действительную координату, но сдвинутую относительно начальной на величину R.

С помощью представлений о комплексном сдвиге мы можем уточнить определение понятия «дополнительное подпространство», которое используется в ТФП. Дополнительным к данному вещественному подпространству $P_1 \cup M_1$ является такое вещественное подпространство $P_2 \cup M_2$, свойства которого отображаются на первое через комплексный сдвиг. Иными словами, свойства объекта, которые он проявляет, например, во втором подпространстве, отображаются на первое так, как если бы в первом подпространстве мы могли наблюдать структуру объекта во втором подпространстве, видоизмененную соответствующим комплексным сдвигом.

Таким образом, переход от одного действительного подпространства к другому, ему дополнительному, осуществляется через операцию комплексного сдвига и означает невозможность непрерывного аналитического перехода.

Такова структура математических объектов, которые используются в ТФП. С учетом указанных особенностей к ним применимы теоремы, справедливые для обычных римановых пространств, что облегчает их использование, и, следовательно,

---

[1] Прием комплексного сдвига, известный в принципе давно, последние годы получает все большее распространение как формальный математический метод [14, 15].

$$ds^2_{(i)} = g^{(i)}_{ik}\, dx^i_{(i)}\, dx^k_{(i)}, \qquad (2)$$

где i — индекс подпространства.

Основное требование, которое должно быть предъявлено к единой замкнутой теории, состоит в том, что свойства пространства — времени и фундаментальных (определяющих свойства пространства) физических объектов должны быть взаимно и однозначно самосогласованы в рамках самой теории. В ТФП рассматривается два фундаментальных объекта: а) элементарные частицы вакуума — ЭЧВ; б) элементарные частицы вещества — ЭЧ. Под понятием «вещество» подразумеваются физические объекты, обладающие массой, которая рассматривается как мера инерции и в то же время как мера наблюдаемой энергии и энергии связи.

ЭЧ и ЭЧВ образуют все физические структуры вещества: ядра атомов, атомы, молекулы и т. д. Фотоны в ТФП рассматриваются как элементарный акт распространения сигнала в физическом вакууме данного пространства. Поэтому ограничение в рамках ТФП рассмотрением только двух физических объектов не должно нарушать общности. Эти объекты образуют с пространством полностью замкнутое и самосогласованное триединство: пространство — время — вещество. Конечно, более сложные объекты (ядра, атомы, молекулы и т. п.) будут «возмущать» это полностью самосогласованное триединство, но только возмущать, а не определять его.

Таким образом, ТФП отличается от ОТО как математическими объектами (континуально-дискретные римановы пространства, а не обычные римановы), так и физическими объектами (микроскопические фундаментальные ЭЧВ и ЭЧ, а не макроскопические тела). Следовательно, силовые взаимодействия фундаментального поля, ответственные за свойства ЭЧВ и ЭЧ, никоим образом не сводятся к гравитационным.

В отличие от всех ранее предпринятых попыток построения единой теории; в ТФП объекты исследования — ЭЧВ и ЭЧ — рассматриваются в разных подпространствах, каждое из которых ответственно за свой вид взаимодействия. С учетом влияния вакуума на частицы такой подход обеспечивает действительно единый взгляд на все основные процессы, протекающие в веществе (конечно, не в материи вообще).

В ТФП дискретно-континуальная геометрия рассматривается как один из наиболее удобных математических формализмов, предназначенных для решения уравнений, определяющих связь между пространством — временем и веществом.

Эйнштейн предложил в качестве такого уравнения использовать найденную им зависимость между параметрами, характеризующими геометрию пространства: R_{ik} — тензором кривизны, g_{ik} — метрическим тензором — и параметрами, характеризующими вещество: T_{ik} — тензором энергии-импульса, γ — константой взаимодействия и c — предельно допустимой в данном пространстве скоростью

$$R_{ik} - \frac{1}{2} g_{ik} R = \frac{8\pi\gamma}{c^4} T_{ik}. \qquad (3)$$

При этом γ трактовалась как константа, характеризующая только гравитационное взаимодействие.

В ТФП используется открытая Эйнштейном зависимость (3), но рассматривается она в разных подпространствах для всех видов взаимодействия, и поэтому вместо одного уравнения (3) должна быть записана система уравнений

$$R_{ik}^{(i)} - \frac{1}{2} g_{ik}^{(i)} R^{(i)} = \frac{8\pi\gamma_i}{c^4} T_{ik}^{(i)}, \qquad i = 1, 2, 3 \tag{4}$$

где i — индекс данного подпространства.

В отличие от (3) система (4) является полной и поэтому должна дать однозначные решения.

Отметим, что только в области, занятой данным подпространством, $T_{ik} > 0$. Во всех областях, занятых другими подпространствами и являющихся только аналитическим продолжением данного подпространства, $T_{ik} = 0$.

Число этих уравнений, необходимое и достаточное для описания ЭЧ и ЭЧВ, определяется особенностями структуры этих частиц, которая должна удовлетворять уравнениям (4) и условиям полного самосогласования.

В ТФП мы «работаем» в пространстве Эйнштейна, но характеризующем не гравитационное, а фундаментальное поле, описываемое континуально-дискретной геометрией в трех дополнительных одно к другому подпространствах. Рассмотрим решения системы основных уравнений.

Число уравнений. Поскольку каждое из подпространств $P_i \cup M_i$ состоит из дискретной M и континуальной P частей, из (4) следует (для всех трех подпространств):

в подпространстве $P_1 \cup M_1$

для M_1 $$R_{ik}^{(1)} = 0, \tag{5}$$

для P_1 $$R_{ik}^{(1)} - \frac{1}{2} g_{ik}^{(1)} R^{(1)} = \frac{8\pi\gamma_1}{c^4} T_{ik}^{(1)}; \tag{6}$$

в подпространстве $P_2 \cup M_2$

для M_2 $$R_{ik}^{(2)} = 0, \tag{7}$$

для P_2 $$R_{ik}^{(2)} - \frac{1}{2} g_{ik}^{(2)} R^{(2)} = \frac{8\pi\gamma_2}{c^4} T_{ik}^{(2)}; \tag{8}$$

в подпространстве $P_3 \cup M_3$

для M_3 $$R_{ik}^{(3)} = 0, \tag{9}$$

для P_3 $$R_{ik}^{(3)} - \frac{1}{2} g_{ik}^{(3)} R^{(3)} = \frac{8\pi\gamma_3}{c^4} T_{ik}^{(3)}. \tag{10}$$

Итого шесть уравнений. При решении уравнений для дискретных подпространств M мы рассматриваем дополнительные к M континуальные области всего пространства W как аналитическое продолжение дискретного пространства. Мы говорили, что точки M являются вакуумом данного подпространства и определяют в нем характер связи пространства с временем и веществом. Смысл этого состоит в том, что масса в точке (принципиально — точке!) M определяет геометрию окружающего ее пространства — времени.

Для решения уравнений (5), (7) и (9) можно получить информацию о свойствах пространства по найденным значениям R_{ik} и g_{ik}.

В то же время решение этой системы не позволяет найти соответствующие значения γ_i, без которых мы не можем судить о характере взаимодействия. Для определения γ_i необходимо решать уравнения (6), (8) и (10). При этом надо рассматривать поля в пространствах P, а точечные «дырки», принадлежащие дополнительным пространствам M, считать аналитическими продолжениями пространств P.

Одним из важнейших физических принципов ТФП, следующих из необходимости самосогласования решений (5) — (10), является полнота

корпускулярного или полевого описания объекта. Математически эта полнота следует из того, что в каждом подпространстве области P дополнительны к M. Физический смысл ее состоит в том, что если мы исследуем силовое поле элементарной частицы, то не имеем права одновременно рассматривать и локальный заряд, и, наоборот, поле мы должны анализировать без источника.

Заряд фундаментального поля определяется как интеграл

$$q = \frac{1}{4\pi}\int_0^\infty \operatorname{div}\vec{E}\,dV, \quad \left(\text{для } \varphi = \frac{q}{r}e^{\frac{-R_W}{r}}\right)$$

который не расходится и имеет конечное значение q. Но если необходимо выяснить, как действует на частицу внешнее поле, нужно «поместить» этот заряд в центр симметрии — точку, принадлежащую области M.

Принцип полноты корпускулярного и полевого рассмотрения частицы позволяет и уравнения вида (6), (8) и (10) свести к более просто решаемым «частичным» уравнениям, но при этом необходимо учесть, что в точке M находится не только масса, но и заряд, и тогда уравнения (5), (7) и (9) надо представить в виде

$$R_{ik}^{(3)}(m) = 0, \tag{11}$$

а уравнения (6), (8) и (10) — в виде

$$R_{ik}^{(3)}(m, q) = 0. \tag{12}$$

В ТФП постулируется, что фундаментальное поле имеет электромагнитную природу, поэтому формулы вида (12) являются уравнениями Эйнштейна — Максвелла. При решении их на основании принципа соответствия накладывается в нерелятивистском пределе и такое условие на действующие силы:

$$F = \gamma\frac{m_1 m_2}{r^2} \equiv \frac{q_1 q_2}{r^2}. \tag{13}$$

Тождество в правой части означает допустимость как «массового», так и «зарядового» взаимодействий одного и того же объекта.

Чтобы решения основных уравнений теории были полными, необходимо определить физический смысл и численное значение универсальной постоянной c. В ТФП величина c, равная в ОТО скорости света, трактуется как скорость распространения сигнала в физическом вакууме первого подпространства. Невозбужденный физический вакуум рассматривается как система ЭЧВ, равномерно заполняющая все пространство с концентрацией

$$n_W = \frac{1}{8\pi^2 R_W^3}, \tag{14}$$

где R_W — радиус сферы Шварцшильда для ЭЧВ.

ЭЧВ — система, составленная из частиц и античастиц, и в первом подпространстве все их параметры не наблюдаемы. Взаимодействия между ЭЧВ и между ЭЧВ и ЭЧ могут происходить только во втором и третьем подпространствах. В первом — наблюдается только результат этого взаимодействия.

Для нахождения численного значения c необходимо решить для физического вакуума уравнение вида

$$R_{ik} = \text{const}\, g_{ik}, \tag{15}$$

которое в первом подпространстве в пределе $T_{ik} = 0$ приводит к единственному требованию: метрика «пустого», т. е. заполненного ненаблюдаемым

в первом подпространстве вакуумом, должна быть галилеевой. Это приводит к одному из основных постулатов СТО.

Структура ЭЧВ и пространства, которое ими заполнено, а также структура возбужденных состояний элементарных частиц в ТФП определяются из самосогласованных решений уравнений (4). Методически удобно описать уже найденную структуру, а далее показать, что она соответствует самосогласованным решениям основных уравнений теории.

Глава 3

СТРУКТУРА И ПАРАМЕТРЫ ЧАСТИЦ

Определение структуры элементарных частиц

Еще Уилер [28] показал, что в рамках ОТО принципиально возможно получить устойчивое заряженное образование, которое он назвал «геоном». Попытки получить геон на уровне элементарных частиц делались неоднократно (см., например, [29]). Идеологически к этим работам примыкают и попытки построить теорию элементарных частиц на базе «самой элементарной частицы» в теории гравитации, которые предпринимают в течение ряда лет М. А. Марков [30] и К. П. Станюкович [31]. Эту, так сказать, действительно элементарную частицу они называют «максимоном» (М. А. Марков [30]) или «планкеоном» (К. П. Станюкович [31]).

Согласно ТФП, и геоны, и максимоны-планкеоны не могут быть истинными «кирпичиками мироздания», так как в этом случае предполагается, что в основе лежит гравитационное поле, характеризуемое константой гравитации, а не фундаментальное поле.

Устойчивые структуры образует только фундаментальное поле. Это поле проявляет себя в виде локальных образований (частиц) и в виде силового поля, образованного вакуумом во всем пространстве. Частицы — это черные дыры в данном пространстве. Понятно, что в каждом пространстве частица проявляется как точка, которая обладает некоторыми свойствами, определяемыми поведением физических объектов, находящихся под сферой Шварцшильда внутри черной дыры. Такие объекты можно рассматривать как субчастицы.

То, что мы сейчас называем элементарными частицами — это полностью возбужденные черные дыры вакуума первого подпространства. Свойства ЭЧ должны определяться поведением субчастиц внутри этих черных дыр. Структуру и свойства системы субчастиц, порождающих ЭЧ, необходимо описать уже во втором подпространстве. Полученный результат надо отобразить на первое подпространство и получить искомые свойства ЭЧ, а следовательно, и элементарных частиц вакуума первого подпространства.

Под сферой Шварцшильда каждой ЭЧ во втором подпространстве имеется еще одна черная дыра, которая ответственна за свойства субчастиц во втором подпространстве. Под сферой Шварцшильда этой черной дыры в третьем подпространстве есть своя субструктура. Существует определенная связь

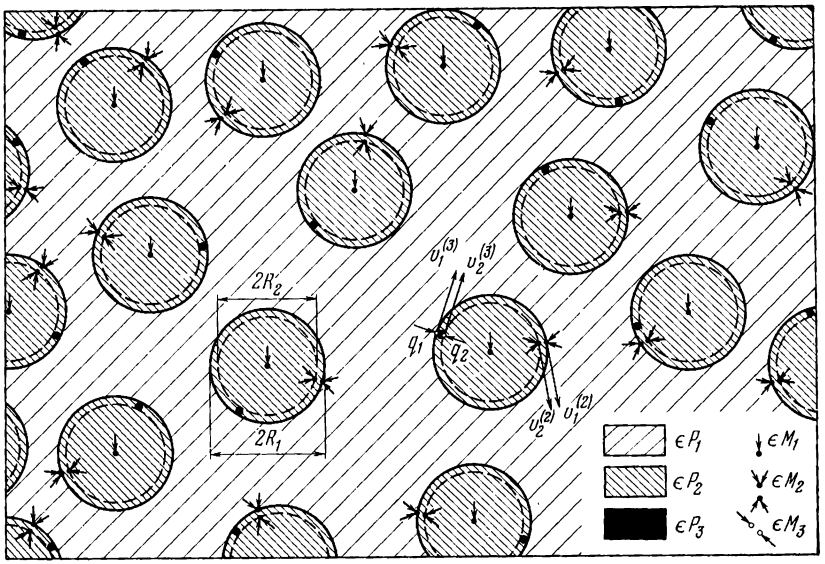


Рис. 1. Схематическое изображение трех подпространств, образующих триединство: Пространство — Время — Вещество (без временно́й координаты)

между всеми частицами, находящимися в одном и том же подпространстве и между субчастицами, образующими ЭЧ и ЭЧВ.

Итак, любая ЭЧ имеет такую структуру (рис. 1). В «лабораторной» системе координат, где ЭЧ выступает как единое целое, она рассматривается в первом подпространстве $P_1 \cup M_1$, для которого дополнительным является пространство, ограниченное «наружным» радиусом. Внутри этой сферы находится сколлапсированная структура частицы. Эта структура описывается только во втором подпространстве $P_2 \cup M_2$, для которого дополнительным служит уже подпространство $P_3 \cup M_3$. Третье подпространство $P_3 \cup M_3$ не имеет внутри себя дополнительных подпространств и, по определению, является последним. ЭЧВ рассматривается в теории как пара устойчивых античастиц [7], которые после аннигиляции не наблюдаются в данном подпространстве, хотя продолжают существовать в дополнительном к нему подпространстве.

Таким образом, для описания ЭЧ необходимо и достаточно рассмотрение их в трех подпространствах:

$$W = \bigcup P_i \bigcup M_i, \qquad i = 1, 2, 3. \tag{16}$$

В первом подпространстве ЭЧ — точечный объект, свойства которого в рамках этого подпространства можно либо постулировать, либо определять из эксперимента. Физические свойства ЭЧ определяются только во «втором» подпространстве, в котором «видна» структура ЭЧ. Свойства «субчастиц» во втором подпространстве определяются в третьем и первом подпространствах.

Убедимся теперь в том, что такая структура соответствует решениям основных уравнений ТФП и условиям самосогласования.

Рассмотрим для начала уравнения вида (11). Для обеспечения самосогласования расчетов во всех подпространствах необходимо обеспечить возможность сочетания граничных условий. Это лишает нас возможности произвольно распорядиться выбором начала отсчета («базиса» по Фоку [21]) и ориентации этого базиса, т. е. выбора системы координат. Поэтому в качестве начала отсчета берется центр симметрии (см. рис. 1), а система координат — «сопутствующая» [13], т. е. такая, по отношению к которой сама частица (первое подпространство) или ее субчастицы (второе и третье) покоятся.

Для центрально-симметрического поля статической или стационарной задачи имеем

$$ds^2 = g_{00}c^2dt^2 - g_{11}dr^2 - g_{22}d\theta^2 - g_{33}d\varphi^2. \tag{17}$$

Учитывая уравнение Гамильтона — Якоби

$$g^{ik}\frac{\partial S}{\partial x^i}\frac{\partial S}{\partial x^k} - m^2c^2 = 0$$

и рассматривая движение в плоскости ($d\theta = 0$), получим,

$$\frac{1}{g_{00}}\left(\frac{\partial S}{c\,dt}\right)^2 - \frac{1}{g_{11}}\left(\frac{\partial S}{\partial r}\right)^2 - \frac{1}{g_{33}}\left(\frac{\partial S}{\partial \varphi}\right)^2 - m^2c^2 = 0. \tag{18}$$

В нашей задаче нужно искать решение в виде

$$S = -Et + M\varphi + S_r(r).$$

Тогда

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -E;\ \frac{\partial S}{\partial \varphi} = M;\ \frac{\partial S}{\partial r} = \frac{\partial S_r}{\partial r}.$$

Для $(\partial S_r/\partial r)^2$ имеем

$$\left(\frac{\partial S_r}{\partial r}\right)^2 = \frac{g_{11}}{g_{00}}\frac{E^2}{c^2} - \left(m^2c^2 + \frac{M^2}{g_{33}}\right)g_{11},$$

т. е.

$$S_r = \int\sqrt{\frac{g_{11}}{g_{00}}\frac{E^2}{c^2} - \left(m^2c^2 + \frac{M^2}{g_{33}}\right)g_{11}}\,dr. \tag{19}$$

Найдем значение производной

$$\frac{\partial S_r}{\partial M} = -\int\frac{\frac{g_{11}}{g_{33}}M\,dr}{\sqrt{\frac{g_{11}}{g_{00}}\frac{E^2}{c^2} - \left(m^2c^2 + \frac{M^2}{g_{33}}\right)g_{11}}}. \tag{20}$$

Но $-\frac{\partial S_r}{\partial M} = \varphi$, и, следовательно,

$$\varphi = \int\frac{g_{11}}{g_{33}}\frac{M\,dr}{\sqrt{\frac{g_{11}}{g_{00}}\frac{E^2}{c^2} - \left(m^2c^2 + \frac{M^2}{g_{33}}\right)g_{11}}}. \tag{21}$$

А так как $g_{11} = 1/g_{00}$, то

$$\varphi = \int\frac{M\,dr}{g_{33}\sqrt{\frac{E^2}{c^2} - \left(m^2c^2 + \frac{M^2}{g_{33}}\right)g_{00}}}.$$

Но $g_{33} = r^2$, поэтому

$$\varphi = \int \frac{M\,dr}{r^2 \sqrt{\frac{E^2}{c^2} - \left(m^2c^2 + \frac{M^2}{g_{33}}\right) g_{00}}}. \tag{22}$$

Поскольку всегда $\omega = d\varphi/dt$, можно записать

$$\omega = \frac{d\varphi}{dt} = \frac{M}{r^2 \sqrt{\frac{E^2}{c^2} - \left(m^2c^2 + \frac{M^2}{r^2}\right) g_{00}}} \frac{dr}{dt}.$$

Так как $v = \omega r$, обозначив $dr/dt = v_r$, это уравнение можно выразить в виде

$$\omega = \frac{M}{r^2 \sqrt{\frac{E^2}{c^2} - \left(m^2c^2 + \frac{M^2}{r^2}\right) g_{00}}} v_r,$$

откуда

$$\frac{M}{r \sqrt{\frac{E^2}{c^2} - \left(m^2c^2 + \frac{M^2}{r^2}\right) g_{00}}} = \frac{v}{v_r}$$

или

$$g_{00} = \frac{\frac{E^2r^2}{c^2} - M^2 \frac{v_r^2}{v^2}}{m^2c^2r^2 + M^2}. \tag{23}$$

Из этого уравнения для определенных зависимостей между $E(m)$ и $M(m, r)$ можно получить выражение для g_{00}. Действительно, если $M^2 = \frac{m^2v^2r^2}{f^2(\beta)}$ и $E = \frac{mc^2}{f(\beta)}$, то

$$g_{00} = \frac{1 - \beta_r^2}{f^2(\beta) + \beta^2}, \tag{24}$$

где

$$\beta_r = \frac{v_r}{c}; \quad \beta = \frac{v}{c}.$$

Поскольку в этом уравнении есть радиальная скорость v_r и тангенциальная скорость v, полученное решение может рассматриваться только во втором и третьем подпространствах, а также в модели, соответствующей отображению второго подпространства на первое. Последняя модель не наблюдается ни в первом, ни во втором подпространствах, она находится в комплексном пространстве, но определяет свойства и параметры частиц, наблюдаемых в первом подпространстве в виде неделимых точечных бесструктурных субчастиц.

Во всех трех случаях мы рассматриваем структуру частицы в сопутствующей или, что в данном случае эквивалентно, в собственной системе координат. Поскольку в ТФП, так же как и в ОТО (см. в [21]), неинерциальное движение абсолютно, линейная тангенциальная скорость v имеет определенный физический смысл и должна учитываться при $v_r \neq 0$.

Для конкретности разберем решения (24) для ЭЧ, которые могут образовать ЭЧВ, в собственной системе координат.

В ТФП в третьем и во втором подпространствах структура ЭЧ и ЭЧВ, находящихся под сферой Шварцшильда, описывается в собственной системе координат, где v_r численно равна v, а v как относительная скорость отсутствует, но имеет смысл линейной скорости вращения и должна определять метрические свойства соответствующего пространства — времени.
Тогда из (24) имеем

$$\begin{aligned} g_{00}^{(2)} &= \frac{1-\beta^2}{1+\beta^2}, && (f(\beta)=1); \\ g_{00}^{(3)} &= \frac{1-\beta^2}{\beta^2+(1-\beta^2)^3}, && (f(\beta)=(1-\beta^2)^{3/2}); \\ g_{00}^{(2\to 1)} &= (1-\beta^2), && (f(\beta)=(1-\beta^2)^{1/2}). \end{aligned} \tag{25}$$

Во всех случаях, когда при переходе по другую сторону сферы Шварцшильда должна измениться сигнатура в (17). В тех случаях, когда $\beta_r = 0$ (стационарные орбиты) и новое значение g_{00} соответствует старому g_{11}, вместо (25) имеем

$$\begin{aligned} g_{00}^{(2)} &= 1+\beta^2, \\ g_{00}^{(3)} &= \beta^2+(1-\beta^2)^3, \\ g_{00}^{(2\to 1)} &= 1. \end{aligned} \tag{26}$$

Чтобы исчерпать все возможные значения g_{00} для различных условий движения ЭЧ и их структурных элементов в фундаментальном поле, учтем дополнительное условие минимума энергии (максимума устойчивости), соответствующего данному значению g_{00}, т. е. условие $dE/dg_{00} = 0$.

Из (19), учитывая, что $g_{00} = 1 - \frac{r_\gamma}{r}$; $g_{33} = r^2$; $r_\gamma = \frac{2\gamma m_\alpha}{c^2}$ (m_α — масса, создающая поле), имеем

$$E^2 = [A_m(1-g_{00})^2 + m^2c^2 + g_{00}A_s(g_{00})]\, g_{00}c^2, \tag{27}$$

где

$$A_m = \frac{M^2}{r_\gamma^2}; \quad A_s(g_{00}) = \left(\frac{\partial S_r}{\partial r}\right)^2;$$

m — масса, движущаяся в поле, созданном массой m_α. Налагая на (27) условие $dE/dg_{00} = 0$, имеем

$$A_m(g_{00}-1)(3g_{00}-1) + m^2c^2 + \frac{dA_m(g_{00})}{dg_{00}}(1-g_{00})^2 g_{00} + 2A_s(g_{00})\, g_{00} + \frac{dA_s}{dg_{00}} g_{00}^2 = 0. \tag{28}$$

На поверхности сферы Шварцшильда $r = r_\gamma$ и $g_{00} = 0$, и с учетом того, что $M = \frac{mvr}{f(\beta)}$, (28) приводит к условиям

$$r_\gamma^2 = \frac{-m_\alpha^2 4\gamma^2 f^2(\beta)}{c^4\beta^2}; \quad f^2(\beta) = -\beta^2.$$

Но должно быть $r = \frac{4\gamma^2 m_\alpha^2}{m^2c^4}$, следовательно, на поверхности сферы Шварцшильда $\beta = 1$; $f(\beta) = 1$ и масса m_α — мнимая величина. Таким образом, устойчивая орбита на поверхности этой сферы возможна только во втором подпространстве ($f(\beta) = 1$). При этом в точке $r = r_\gamma$ $\beta = 1$. Сопоставляя этот резуль-

тат со значением $g_{00}^{(2)}$, приведенном в (25), видим, что

$$g_{00}^{(2)} = \frac{1 - \frac{r_\gamma}{r}}{1 + \frac{r_\gamma}{r}}, \qquad \frac{r_\gamma}{r} = \beta^2,$$

что соответствует в ОТО решению Фока [21] уравнения Шварцшильда.

Если $A_s(g_{00}) = a_M M$ (a_M — постоянный множитель), то (28) имеет решения

$$g_{00} = \frac{1}{2}; \qquad g_{00} = 1; \qquad g_{00} = 0.$$

Рассматривая задачу[1] движения субчастиц по устойчивой орбите ($dr = 0$) и полагая, что $A_m = \text{const}$, получим из (28)

$$A_m (g_{00} - 1)(3g_{00} - 1) + m^2c^2 = 0. \tag{29}$$

Решение этого уравнения при $g_{00} > 0$ определяет область существования наиболее устойчивых орбит над сферой Шварцшильда. Оказывается, что только при $g_{00} = 2/3$ (что соответствует $r = 3r_\gamma$) существует устойчивая орбита. Причем уровень ее устойчивости достаточно высок. Масса вращающегося на этой орбите тела уменьшается за счет энергии связи и становится равной $\sqrt{8/9}\, m$. Соответственно уменьшается энергия mc^2.

В ТФП структура истинно элементарной частицы находится под сферой Шварцшильда. Движение над сферой у данной ЭЧ может характеризовать только систему из двух частиц — первый вид составных элементарных частиц. Далее при рассмотрении методов расчета частиц мы увидим, что коэффициент $\sqrt{9/8} \equiv \frac{3}{2\sqrt{2}}$ играет в расчетной схеме ТФП большую роль [6].

Частное решение (28) может быть использовано и для анализа стационарных орбит под сферой Шварцшильда. Необходимо только учесть, что в данном случае, так же как и при движении по стационарной орбите на самой сфере Шварцшильда, $m_\alpha^2 < 0$. Какой в этом физический смысл? В ТФП это означает, что найденную в общем виде структуру ЭЧ надо уточнить следующим образом. Субчастицы во втором и третьем подпространствах представляют собой масс-диполь (по удачному наименованию Хенля [33], впервые исследовавшего подобные модели). Понятно, что в центрально-симметрическом поле масс-диполь, состоящий из положительной m_+ и отрицательной m_- масс будет вращаться около общего центра инерции, вынесенного за пределы дипольного плеча в сторону положительной массы. Таким образом, m_+ будет вращаться на внутренней орбите, а m_- — на наружной. Понятно, что объектом, движущимся в данном силовом поле, будет разность указанных масс, т. е. $m = m_+ - m_-$. Это и есть наблюдаемая масса всей ЭЧ, если $m_+ > m_-$. Возникает вопрос, какая масса создает поле? Легко понять, что создает поле сумма масс

$$m_\alpha = m_+ + m_-.$$

Если $(m_+ + m_-) \gg (m_+ - m_-) \equiv m$, то задача о движении m в поле m_α может рассматриваться как самосогласованная и решаться с помощью приведенных уравнений.

[1] Аналогичную задачу в ОТО решал Каплан [32].

Для иллюстрации сказанного рассмотрим такое частное решение. Обозначая индексом 1 параметры, относящиеся к орбите, по которой движется m_- (наружная орбита), и индексом 2— по внутренней орбите, получим для масс-диполя из (29)

$$M = \frac{2m\gamma\,(|\,m_+\,| + |\,m_-\,|)}{c\,(1 - g_{00})^{1/2}\,(3g_{00} - 1)^{1/2}}\,.$$

Учитывая, что для системы из двух круговых токов

$$g_{00} = (\beta_1^2 - \beta_2^2),$$

а также зависимость между массами [12]

$$(m_+^{(2)} + m_-^{(2)})^2 = -\left[\frac{m}{(1 - \beta_1^2)}\right]^2,$$

находим

$$M = 2m^2\gamma/c\,[(1 - g_{00})^{1/2}(1 - 3g_{00})^{1/2}(1 - \beta_1^2)]^{-1}.$$

И тогда

$$\gamma = (1 - \beta_1^2)(1 - g_{00})^{1/2}(1 - 3g_{00})^{1/2}\frac{Mc}{2m^2}\,, \tag{30}$$

а энергия E имеет резкий минимум, так как $g_{00} \ll 1$,

$$E = mc^2\frac{2^{1/2}g_{00}}{1 - 3g_{00}}\,,$$

характеризующий большую степень устойчивости системы.

Указанные уравнения необходимы и достаточны для доказательства существования устойчивых структур такого типа в рамках ТФП, но не дают возможности рассчитать все параметры таких структур. В [6] и [7] для решения этой проблемы был использован постулат о том, что природа фундаментального поля имеет электромагнитное происхождение, хотя и не сводится к уравнениям Максвелла.

В этом случае оказалось достаточным наложить на заряды фундаментального поля условия неизлучения для того, чтобы совместно с условиями, полученными из решения (4), приобрести возможность расчета всех параметров ЭЧ.

Так, между $g_{00}^{(2)}$ и β_1, β_2 была найдена зависимость, верная для всех ЭЧ,

$$g_{00} = \beta_1^2 - \beta_2^2.$$

Тогда из (30) имеем

$$\gamma = (1 - \beta_1^2)\,[1 - (\beta_1^2 - \beta_2^2)]^{1/2}\,[1 - 3(\beta_1^2 - \beta_2^2)]^{1/2}\frac{Mc}{2m^2}\,.$$

Очевидно, что для первого подпространства, где проявляются только разности масс и зарядов фундаментального поля, в предельном переходе к взаимодействиям, наблюдаемым в евклидовом пространстве, мы должны получить взаимодействие, которое мы называем сейчас электромагнитным,

$$\frac{\alpha\hbar c}{r^2} \equiv \frac{\gamma}{r^2}\left(\frac{\pi m}{2}\right)m.$$

Таким образом, для самосогласованной теории должно иметь место равенство

$$\alpha = \frac{\pi}{2}\gamma\frac{m^2}{\hbar c}.$$

Подставляя найденное выражение для γ и численные значения безразмерных величин β_1 и β_2 для протона (см. стр. 45), получим

$$\alpha_p = \pi\,[1-(\beta_1^2-\beta_2^2)]^{1/2}\,[1-3(\beta_1^2-\beta_2^2)]^{1/2}(1-\beta_1)^2\,\frac{\beta_1}{\beta_2} = 7{,}29730\cdot 10^{-3}, \quad (31)$$

т. е. равно α.

Такое поразительное совпадение теоретического и опытного значений безразмерной константы α является ярким свидетельством в пользу описываемой здесь модели.

Вопрос о решениях основных уравнений ТФП с учетом влияния на g_{ik} заряда и механического момента будет рассмотрен отдельно в одной из последующих глав этого раздела.

Чтобы сделать следующий шаг в выяснении структуры ЭЧ, необходимо подробнее разобраться в свойствах ЭЧВ и образованного ими физического вакуума (ср. [33—40]).

В ТФП под частицей вакуума понимается система, которая возникла при аннигиляции частицы и античастицы в первом подпространстве. Такая ЭЧВ образует систему, масса которой равна нулю и которая не создает в пространстве никаких сил, кроме внутренних напряжений в вакууме. ЭЧВ, заполняя первое подпространство с концентрацией

$$n_W = \frac{1}{8\pi^2 R_W^3},$$

ответственны за распространение сигнала, возмущающего эти частицы. Из структуры ЭЧВ ясно, что сигнал должен распространяться со скоростью, соответствующей скорости распространения поперечных волн деформации сдвига в безграничной среде

$$v_W^{(1)} = \sqrt{\frac{\mathfrak{G}}{\rho}},$$

где модуль сдвига

$$\mathfrak{G} = \frac{m v_1^2}{8\pi^2 R_W^3 \varepsilon_W};$$

ρ — плотность частиц в вакууме.

Подставляя соответствующие значения, получим

$$v_{(W)}^{(1)} = \sqrt{\frac{2s\hbar c 8\pi^2 R_W^4 c\varepsilon_W \beta}{\varepsilon_W 8\pi^2 R_W^4 2s\hbar\beta}} = c.$$

Таким образом, для ЭЧВ теория показывает, что в вакууме, созданном этими частицами, скорости сигнала («скорость света») и возмущения ЭЧВ, имеющих указанную структуру, одни и те же.

Во втором подпространстве $P_2 \cup M_2$ скорость $v_W^{(2)} = v_W^{(1)}$, так как сигнал возмущения, возникший во втором подпространстве любой ЭЧ или

ЭЧВ, будет распространяться только в первом подпространстве. В третьем же этот сигнал будет распространяться уже в подпространстве $P_2 \cup M_2$ со скоростью большей, чем $v_W^{(1)}$, в n раз (где n — число «субчастиц»). Эти своеобразные тахионы являются мельчайшими составными элементами ЭЧ и ЭЧВ. В третьем подпространстве у каждой ЭЧ всего одна пара субчастиц.

Во втором подпространстве, как легко видеть, эта пара частиц во всем, что касается силовых взаимодействий, связанных с вакуумом первого и второго подпространств, ведет себя как система из n_1 и n_2 частиц, где n_1, n_2 есть отношение скоростей распространения сигнала в третьем и первом или втором подпространствах.

Таким образом в ТФП ясный физический смысл приобретают:

а) отрицательные массы, рассматриваемые как проявление отрицательных сил инерции одной из пары очень сильно взаимодействующих частиц. Выделение самостоятельно существующих субчастиц, обладающих отрицательной массой, н е в о з м о ж н о;

б) мнимые массы, численно равные во втором подпространстве сумме абсолютных значений положительных и отрицательных масс, которые вносят определяющий вклад в формирование хроногеометрических свойств пространства, но сказываются на инерциальных свойствах системы с учетом знака, т. е. как разность абсолютных значений. Понятно, что мнимые массы сами по себе ненаблюдаемы;

в) «продольные» и «поперечные» массы, различие в которых связано с существованием отрицательных и мнимых масс. «Продольные» массы как мера инерции ЭЧ или ЭЧВ и тем более объектов, созданных ими, проявляться не могут;

г) объекты, движущиеся со скоростью, бóльшей скорости света (тахионы),— элементарные частицы третьего подпространства. Тахионы ни в каких экспериментах, связанных с ЭЧ или ЭЧВ первого и второго подпространства, а тем более со сложными объектами, которые есть только в первом подпространстве, проявляться не могут.

Чтобы убедиться в жизнеспособности рассматриваемой структуры для ЭЧ, необходимо показать, что в первом подпространстве каждая ЭЧ могла существовать как устойчивое в свободном состоянии образование. Безразлично, какова степень устойчивости; важно, чтобы частица могла успеть за время существования проявить индивидуальные свойства.

Поскольку фундаментальное поле имеет электромагнитную природу и истоками его являются заряды, мы должны показать, что они не излучают. Рассмотрим, какие условия должны быть наложены на структуру субчастиц во втором подпространстве для того, чтобы эти субчастицы, двигаясь по окружности, тем не менее не излучали энергии и, конечно, образовывали механически устойчивую систему. Это требование мы должны предъявлять модели, которая является отображением модели второго подпространства на первое.

Известно, что никакая комбинация покоящихся зарядов не может быть устойчивой. Этого требует теорема Ирншоу [41—42].

Д. Бом и В. Вайнштейн [43], используя идею М. А. Маркова [44], сделали попытку найти такую систему зарядов, которая, осциллируя в малом объеме со скоростями, много меньшими скорости света, сохраняет устойчивость. Полученный результат вызвал дискуссию, закончившуюся достаточно, по нашему мнению, убедительным доказательством [45—46] невозможности существования таких устойчивых систем.

Осталась единственная, до сих пор полностью не рассмотренная возможность — система зарядов, осциллирующих в малом объеме со скоростями, близкими к скорости света.

Поведение ультрарелятивистского ротатора исследовалось Д. Д. Иваненко и А. А. Соколовым [47] и другими авторами [48—52], однако возможность существования систем зарядов, которые бы в таком случае не излучали, насколько нам известно, не выяснялась, если не считать тривиального случая круговых токов, которые не излучают.

Проанализируем излучение ультрарелятивистского ротатора [47]. В этом случае излучение образует спектр частот, поэтому нельзя ограничиться рассмотрением первой или первых гармоник. Напомним результат, полученный в [47]. Компоненты Фурье векторного потенциала в самом общем виде можно выразить так:

$$A = \sum_{-\infty}^{+\infty} \frac{qe^{-in\left(\omega t - \frac{\omega r}{c} - \varphi + \frac{\pi}{2}\right)}}{2\pi rc} \int_{-\pi}^{\pi} ve^{i(n\alpha - n\beta \sin\theta \sin\alpha)}\, d\alpha, \tag{32}$$

где $\alpha = \omega t - \varphi + \pi/2$; n — номер гармоники; $\beta = v/c$; θ — угол наклона по отношению к оси вращения; r — радиус-вектор от центра. В сферических координатах для проекций вектора-потенциала имеем

$$A_\varphi(n) = \frac{qv}{2\pi rc} \int_{-\pi}^{\pi} \sin\alpha \cdot e^{i(n\alpha - n\beta \sin\theta \sin\alpha)}\, d\alpha, \tag{33}$$

$$A_\theta(n) = \frac{qv}{2\pi rc} \cos\theta \int_{-\pi}^{\pi} \cos\alpha \cdot e^{i(n\alpha - n\beta \sin\theta \sin\alpha)}\, d\alpha. \tag{34}$$

Перейдя к обозначениям, принятым в теории цилиндрических функций, и учитывая, что, согласно [53—54],

$$J_n(n\beta \sin\theta) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{i(n\alpha - n\beta \sin\theta \sin\alpha)}\, d\alpha \tag{35}$$

и

$$\frac{2}{\beta \sin\theta} J_n(n\beta \sin\theta) = J_{n+1}(n\beta \sin\theta) + J_{n-1}(n\beta \sin\theta), \tag{36}$$

получим

$$A_\varphi(n) = i \frac{qV}{cr} J'_n(n\beta \sin\theta), \tag{37}$$

$$A_\theta(n) = -\frac{q}{r} \operatorname{ctg}\theta J_n(n\beta \sin\theta). \tag{38}$$

Тогда для проекций векторов электрического и магнитного полей имеем

$$H_\theta = -E_\varphi = -\frac{1}{r}\frac{\partial(rA_\varphi)}{\partial r} = \frac{2q\beta^2}{Rr} \sum_{n=1}^{\infty} nJ'_n(n\beta \sin\theta) \cos n\gamma, \tag{39}$$

$$H_\varphi = E_\theta = \frac{1}{r}\frac{\partial(rA_\theta)}{\partial r} = -\frac{2q\beta}{Rr} \operatorname{ctg}\theta \sum_{n=1}^{\infty} nJ_n(n\beta \sin\theta) \sin n\gamma \tag{40}$$

$$\left(\text{где } \gamma = \omega t - \frac{\omega r}{c} - \varphi + \frac{\pi}{2}\right),$$

откуда радиальная составляющая вектора Пойнтинга

$$\sigma_r = \frac{c}{4\pi}(H_\varphi^2 + H_\theta^2) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{q^2 n^2 \beta^2 c}{2\pi R^2} [\operatorname{ctg}^2 \theta J_n^2 (n\beta \sin\theta) + \beta^2 J_n'^2 (n\beta \sin\theta)]. \quad (41)$$

Интенсивность излучения на каждой данной гармонике выразится соответственно так:

$$G_n = \frac{q^2 n^2 \beta^2 c}{2\pi R^2} [\operatorname{ctg}^2 \theta J_n^2 (n\beta \sin\theta + \beta^2 J_n'^2 (n\beta \sin\theta)]. \quad (42)$$

Переход от ротатора к серии равномерно движущихся по окружности зарядов осуществляется с помощью «фактора когерентности» [47]

$$S_N = N(-1)^n \frac{\sin \pi n}{\operatorname{tg} \frac{\pi n}{N}}, \quad (43)$$

где N — число равномерно расположенных зарядов. Общая интенсивность излучения N зарядов на n-й гармонике будет

$$G_{nN} = S_N G_n. \quad (44)$$

Теперь, используя полученные в [47] результаты, подойдем к решению нашей задачи.

Найдем номер гармоники, которая излучает максимум под некоторым углом θ по отношению к оси вращения. Очевидно, что этот максимум находится из уравнения

$$\frac{dG_{nN}}{d\theta} = 0. \quad (45)$$

Фиксируем n и дифференцируем по θ, так как, по определению, $J_n'(z) = \frac{d[J_n(z)]}{dz}$, а у нас $z = n\beta \sin\theta$ и n определяет порядок бесселевой функции. Подставляя в (45) значение G_{nN} из (44) с учетом (42), дифференцируя и проделав простейшие преобразования, получим

$$\beta^2 \frac{J_n''(n\beta\sin\theta)}{J_n(n\beta\sin\theta)} = \frac{1}{n\beta\sin^3\theta} \frac{J_n(n\beta\sin\theta)}{J_n'(n\beta\sin\theta)} - \frac{\cos^2\theta}{\sin^2\theta}. \quad (46)$$

Откуда с учетом рекуррентных соотношений для бесселевых функций [51, 52] будем иметь

$$n = \frac{\beta\sin\theta \frac{J_n'(n\beta\sin\theta)}{J_n(n\beta\sin\theta)} + \frac{1}{\beta\sin\theta} \frac{J_n(n\beta\sin\theta)}{J_n'(n\beta\sin\theta)}}{1 - \beta^2\sin^2\theta + \cos^2\theta}. \quad (47)$$

Очевидно, что это уравнение справедливо для любого числа регулярно расположенных по окружности зарядов, так как у них должен быть один и тот же максимум излучения под данным углом θ.

Напомним, что в электродинамике максимум излучения первой гармоники направлен под углом порядка $(1 - \beta^2)^{1/2}$ к плоскости вращения, следующие гармоники имеют меньший угол, а критические ($n = n_\beta$) и бо́льшие гармоники лежат в плоскости вращения.

Поэтому нас интересует гармоника, которая дает максимум излучения в плоскости вращения, т. е. при $\cos\theta = 0$. В этом случае

$$n_\beta = \frac{\beta \frac{J_n'(n\beta)}{J_n(n\beta)} + \frac{1}{\beta}\frac{J_n(n\beta)}{J_n'(n\beta)}}{1-\beta^2}. \qquad (48)$$

Мы получили информацию о числе субзарядов, движущихся на окружности, но если их число конечно, то они все равно будут излучать. Кроме того, трудно обеспечить устойчивость зарядов, расположенных только на одной окружности.

Неизлучающей и устойчивой оказалась система зарядов, расположенных на двух концентрических окружностях. Убедимся в этом.

Все параметры зарядов, расположенных на наружной окружности, обозначим индексом 1, а на внутренней — индексом 2. В тех случаях, когда зависимости одинаковы, будем пользоваться индексом β.

Выясним условия, при которых излучение наружных зарядов может целиком компенсировать излучение внутренних. Для этого, очевидно, в любой точке пространства излучение должно быть противофазным, равным по длине волны и иметь одинаковую амплитуду. Понятно, что эти условия должны соблюдаться на всех гармониках. Поскольку мы рассматриваем излучение в плоскости вращения, нас интересуют только номера гармоник, бо́льшие или равные номеру гармоники, определенной из (48).

Легко видеть, что взаимная компенсация излучения двух рассматриваемых систем зарядов на гармониках, излучение которых лежит вне плоскости вращения, невозможна, так как нельзя одновременно удовлетворить условию противофазности, синхронности и в то же время однонаправленности. Действительно, известно [47], что круговой ток не излучает, т. е., когда $N \to \infty$, излучения нет. Но если N конечно, то всегда найдутся гармоники, для которых n/N — целое число, и на них будет излучение. Поэтому, чтобы погасить излучение на этих гармониках, необходимо удовлетворить условию их однонаправленности, которое для ряда гармоник двух мультиротаторов выполняется только тогда, когда вектор Пойнтинга всех гармоник лежит в плоскости вращения. Таким образом, число зарядов N должно удовлетворять условию

$$N \geqslant n_3. \qquad (49)$$

Когда $N = n_3$, система излучает уже на минимально допустимой гармонике. Если $N > n_3$, то излучение происходит на гармониках, кратных n_β. Следовательно, мы должны во всех случаях обеспечить взаимную компенсацию излучения на гармониках, кратных n_β, причем обеспечить компенсацию на всех гармониках, номер которых превышает число зарядов мультиротатора.

Условие синхронности для гармоник n_β в случае взаимной компенсации излучения двух систем зарядов, расположенных на двух концентрических окружностях, имеет очень простой вид

$$\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda \qquad (50)$$

или

$$\frac{2\pi R_1}{\beta_1 n_1} = \frac{2\pi R_2}{\beta_2 n_2} = \lambda, \qquad (51)$$

откуда

$$\frac{R_1}{R_2} = \frac{\beta_1 n_1}{\beta_2 n_2}. \tag{52}$$

Так как гашение происходит только на гармонике n_β и ей кратных, то условие (50) или (52) справедливо для всех этих гармоник, поскольку в (51) для других гармоник появится в обеих частях равенства одинаковый множитель.

Условие противофазности будет также одно для всех гармоник

$$R_1 - R_2 = K\lambda, \tag{53}$$

где K — некоторое целое число.

В том случае, когда знаки зарядов на обеих окружностях одинаковы («однозарядное» состояние), в равенстве (53) вместо K должно быть $K/2$.

Из условия (53) с учетом (52) получим

$$R_1 - R_1 \frac{n_2\beta_2}{n_1\beta_1} = \frac{2\pi R_1}{\beta_1 n_1} K \tag{54}$$

или

$$n_1\beta_1 - n_2\beta_2 = 2\pi K. \tag{55}$$

Это и есть условие, которому должны удовлетворять скорости вращения зарядов и номера «критических», определенных из (48) гармоник обеих систем зарядов, для того чтобы системы не излучали.

Амплитудное условие целиком зависит от величины зарядов, поэтому оно может рассматриваться независимо и определяет только соотношение q_1 и q_2.

Согласно (48),

$$n_1 = \frac{\beta_1 \dfrac{J'_{n_1}(n_1\beta_1)}{J_{n_1}(n_1\beta_1)} + \dfrac{1}{\beta_1}\dfrac{J_{n_1}(n_1\beta_1)}{J'_{n_1}(n_1\beta_1)}}{1-\beta_1^2}, \tag{56}$$

соответственно

$$n_2 = \frac{\beta_2 \dfrac{J'_{n_2}(n_2\beta_2)}{J_{n_2}(n_2\beta_2)} + \dfrac{1}{\beta_2}\dfrac{J_{n_2}(n_2\beta_2)}{J'_{n_2}(n_2\beta_2)}}{1-\beta_2^2}, \tag{57}$$

и тогда (55) можно записать так:

$$\frac{\beta_1^2 \dfrac{J'_{n_1}(n_1\beta_1)}{J_{n_1}(n_1\beta_1)} + \dfrac{J_{n_1}(n_1\beta_1)}{J'_{n_1}(n_1\beta_1)}}{1-\beta_1^2} - \frac{\beta_2^2 \dfrac{J'_{n_2}(n_2\beta_2)}{J_{n_2}(n_2\beta_2)} + \dfrac{J_{n_2}(n_2\beta_2)}{J'_{n_2}(n_2\beta_2)}}{1-\beta_2^2} = 2\pi K. \tag{58}$$

Чтобы облегчить нахождение решения уравнения (58), добавим к нему такое очевидное соотношение:

$$n_1 - n_2 = K_1, \tag{59}$$

где K_1 — некоторое целое число.

Тогда вместе с (58) мы будем иметь систему двух уравнений

$$\frac{\beta_1^2}{1-\beta_1^2}\left[\frac{J'_{n_1}(n_1\beta_1)}{J_{n_1}(n_1\beta_1)}+\frac{J_{n_1}(n_1\beta_1)}{\beta_1^2 J'_{n_1}(n_1\beta_1)}\right]-\frac{\beta_2^2}{1-\beta_2^2}\left[\frac{J'_{n_2}(n_2\beta_2)}{J_{n_2}(n_2\beta_2)}+\frac{J_{n_2}(n_2\beta_2)}{\beta_2^2 J'_{n_2}(n_2\beta_2)}\right]=2\pi K,$$

$$\frac{\beta_1}{1-\beta_1^2}\left[\frac{J'_{n_1}(n_1\beta_1)}{J_{n_1}(n_1\beta_1)}+\frac{J_{n_1}(n_1\beta_1)}{\beta_1^2 J'_{n_1}(n_1\beta_1)}\right]-\frac{\beta_2}{1-\beta_2^2}\left[\frac{J'_{n_2}(n_2\beta_2)}{J_{n_2}(n_2\beta_2)}+\frac{J_{n_2}(n_2\beta_2)}{\beta_2^2 J'_{n_2}(n_2\beta_2)}\right]=K_1 \tag{60}$$

или

$$\begin{aligned} n_1-n_2&=K_1, \\ n_1\beta_1-n_2\beta_2&=2\pi K. \end{aligned} \tag{61}$$

Для решения системы уравнений (60) необходимо воспользоваться каким-то приближением для бесселевых функций. В литературе даны разные представления бесселевых функций, главным образом в виде бесконечных рядов и интегралов. Воспользоваться этими представлениями для решения уравнений (60) весьма затруднительно, даже если на основе полученных соотношений составить алгоритм, в принципе пригодный для использования в электронно-вычислительных машинах.

Поэтому для целочисленных бесселевых функций вида $J_n(n\beta)$ при больших значениях n нам не удалось использовать известные представления. В связи с этим нами была предпринята попытка найти новое приближенное представление этих функций, которая привела к интересному результату. В теории бесселевых функций есть [53, 54] рекуррентные соотношения, которые определяют точные зависимости между ними. Поэтому естественно стремление опираться в основном на них.

В дальнейшем мы воспользуемся рекуррентными формулами

$$2J'_n(z)=2\frac{d}{dz}J_n(z)=J_{n-1}(z)-J_{n+1}(z), \tag{62}$$

$$J_{n-1}(z)+J_{n+1}(z)=\frac{2n}{z}J_n(z) \tag{63}$$

и следствиями из них

$$\frac{d}{dz}J_n(z)=J_{n-1}(z)-\frac{n}{z}J_n(z), \tag{64}$$

$$\frac{d}{dz}J_n(z)=\frac{n}{z}J_n(z)-J_{n+1}(z), \tag{65}$$

$$\left(\frac{d}{z\,dz}\right)^m[z^nJ_n(z)]=z^{n-m}J_{n-m}(z), \tag{66}$$

$$J_{-n}(z)=(-1)^nJ_n(z), \tag{67}$$

где n — натуральное число.

При этом следует помнить [53, 55], что функция $J_n(n\beta)$ есть ряд, составленный из корней уравнения Бесселя

$$J''_n(n\beta)=-\frac{1}{n\beta}J'_n(n\beta)-\left(1-\frac{1}{\beta^2}\right)J_n(n\beta). \tag{68}$$

Из (64) непосредственно следует, что

$$\frac{J'_n(n\beta)}{J_n(n\beta)}=\frac{J_{n-1}(n\beta)}{J_n(n\beta)}-\frac{1}{\beta}, \tag{69}$$

а из уравнения (63)

$$\frac{J_{n-1}(n\beta)}{J_n(n\beta)} + \frac{J_{n+1}(n\beta)}{J_n(n\beta)} = \frac{2}{\beta}. \tag{70}$$

Введем обозначения

$$k_n = \frac{J_n(n\beta)}{J_{n+1}(n\beta)} : \frac{J_{n-1}(n\beta)}{J_n(n\beta)}$$

или

$$k_n = \frac{J_n^2(n\beta)}{J_{n-1}(n\beta)\,J_{n+1}(n\beta)}. \tag{71}$$

Легко видеть, что

$$\lim_{\substack{n\to\infty \\ \beta\to 1}} k_n = 1. \tag{72}$$

При очень больших n величина k_n является медленно и монотонно меняющейся функцией n (или β), причем по порядку величины k_n близко к единице.

Из (71) следует, что

$$\frac{J_{n+1}(n\beta)}{J_n(n\beta)} = \frac{J_n(n\beta)}{k_n J_{n-1}(n\beta)}, \tag{73}$$

и тогда уравнение (70) можно представить в виде

$$\frac{J_{n-1}(n\beta)}{J_n(n\beta)} + \frac{J_n(n\beta)}{k_n J_{n-1}(n\beta)} = \frac{2}{\beta}, \tag{74}$$

откуда

$$\frac{J_{n-1}(n\beta)}{J_n(n\beta)} = \frac{1}{\beta}\left[1 + \sqrt{1 - \frac{\beta^2}{k_n}}\right]. \tag{75}$$

Из выражений (75) и (69) имеем

$$\beta\frac{J_n'(n\beta)}{J_n(n\beta)} = \left(1 - \frac{\beta^2}{k_n}\right)^{1/2}. \tag{76}$$

Следовательно, если $k_n \to \frac{1}{\beta^2}$, то

$$\lim_{\substack{\beta\to 1 \\ n\to\infty}} \beta\frac{J_n'(n\beta)}{J_n(n\beta)} = (1-\beta^4)^{1/2} = 0.$$

Из соображений удобства дальнейших вычислений целесообразно (76) представить в виде

$$\beta\frac{J_n'(n\beta)}{J_n(n\beta)} = m_\beta\,(1-\beta^2)^{1/2}, \tag{77}$$

где m_β, так же как и k_n,— некоторая функция β (или n), причем, как ясно из (76) и (77),

$$m_\beta = \left(\frac{1 - \frac{\beta^2}{k_n}}{1-\beta^2}\right)^{1/2}. \tag{78}$$

С учетом (77) выражению (48) можно придать вид

$$n_\beta = \frac{m_\beta (1-\beta^2)^{1/2} + \dfrac{1}{m_\beta (1-\beta^2)^{1/2}}}{1-\beta^2}$$

или

$$n_\beta = \frac{1 + m_\beta^2 (1-\beta^2)}{m_\beta (1-\beta^2)^{3/2}}, \tag{79}$$

и, следовательно,

$$\lim_{\beta \to 1} n_\beta = \frac{1}{m_\beta (1-\beta^2)^{3/2}} \approx \frac{1}{2^{1/2} (1-\beta^2)^{3/2}}. \tag{80}$$

Таким образом, при достаточно больших β n_β имеет порядок

$$n_\beta = O\left[\frac{1}{(1-\beta^2)^{3/2}}\right]. \tag{81}$$

Итак, даже не имея решения для n_β в явном виде (функция m_β пока не представлена нами в явном виде даже приближенно), можно судить о характере зависимости n_β от β и о порядке величины n_β.

В работе Д. Д. Иваненко и А. А. Соколова [47] найден номер гармоники, при котором ультрарелятивистский ротатор излучает максимум энергии. Номер гармоники выражается у них приближенной формулой

$$n_k \approx \frac{3}{2 (1-\beta^2)^{3/2}}. \tag{82}$$

Как видим, имеет место полное совпадение по порядку величины номеров гармоник, соответствующих максимуму излучения в плоскости вращения n_β, и максимуму излучения без указания направления этого оптимального излучения. Если полагать, что оба максимума должны совпадать точно, то так же точно должны совпадать и (79) и (82).

Д. Д. Иваненко и А. А. Соколов в своих вычислениях использовали приближение, погрешность которого еще не определена [53, 54]. Кроме того, в ряде промежуточных вычислений они пренебрегли членами порядка $(1 - \beta^2)$. С учетом указанных погрешностей совпадение (80) и (82), полученных разными путями, следует признать хорошим. Однако остается еще выяснить, должны ли n_β и n_k совпадать точно.

Для наших целей приближенное выражение для n_β в виде (80) и (81) недостаточно. Поэтому необходимо найти в явном виде выражения для m_β (или k_n).

Непосредственно из (75) следует, что

$$\beta \frac{J_{n-1}(n\beta)}{J_n(n\beta)} = 1 + \left(1 - \frac{\beta^2}{k_n}\right)^{1/2}. \tag{83}$$

Выражая в (83) $\dfrac{J_{n-1}(n\beta)}{J_n(n\beta)}$ через $\dfrac{J_{n+1}(n\beta)}{J_n(n\beta)}$, согласно равенству (73), получим для функции порядка $(n + 1)$ выражение, аналогичное (77),

$$\beta \frac{J_{n+1}(n\beta)}{J_n(n\beta)} = 1 - m_\beta (1-\beta^2)^{1/2}. \tag{84}$$

Чтобы найти искомое выражение для m_β, найдем сначала зависимость отношения производных функций Бесселя к самой функции для функций порядка, отличающегося от n на единицу. Из (64) имеем

$$J'_{n-1}(n\beta) = J_{n-2}(n\beta) - \frac{n-1}{n\beta} J_{n-1}(n\beta) \tag{85}$$

или

$$\frac{J'_{n-1}(n\beta)}{J_{n-1}(n\beta)} = \frac{J_{n-2}(n\beta)}{J_{n-1}(n\beta)} - \frac{1}{\beta}\left(1 - \frac{1}{n}\right). \tag{86}$$

Но из (63) также следует, что

$$\frac{J_{n-2}(n\beta)}{J_{n-1}(n\beta)} = \frac{2}{\beta}\left(1 - \frac{1}{n}\right) - \frac{J_n(n\beta)}{J_{n-1}(n\beta)}. \tag{87}$$

Тогда уравнение (86) после элементарного преобразования можно записать как

$$\frac{J'_{n-1}(n\beta)}{J_{n-1}(n\beta)} = \frac{1}{\beta}\left(1 - \frac{1}{n}\right) - \frac{J_n(n\beta)}{J_{n-1}(n\beta)}. \tag{88}$$

Введем обозначение

$$u = \frac{J_{n-1}(n\beta)}{J_n(n\beta)} \tag{89}$$

и выразим все искомые величины через u, β и n. Тогда (88) примет вид

$$\frac{J'_{n-1}(n\beta)}{J_{n-1}(n\beta)} = \frac{1}{\beta}\left(1 - \frac{1}{n}\right) - \frac{1}{u}. \tag{90}$$

Найдем подобные выражения для функции порядка $n+1$ из равенства (69)

$$\frac{J'_{n+1}(n\beta)}{J_{n+1}(n\beta)} = -\frac{1}{\beta}\left(1 + \frac{1}{n}\right) + \frac{J_n(n\beta)}{J_{n+1}(n\beta)}. \tag{91}$$

Используя (89), приведем (70) к следующему виду:

$$\frac{J_n(n\beta)}{J_{n+1}(n\beta)} = \frac{1}{\frac{2}{\beta} - u}. \tag{92}$$

Тогда, согласно уравнению (92), соотношение (91) можно записать так:

$$\frac{J'_{n+1}(n\beta)}{J_{n+1}(n\beta)} = \frac{1}{\frac{2}{\beta} - u} - \frac{1}{\beta}\left(1 + \frac{1}{n}\right). \tag{93}$$

Аналогично для функции порядка n имеем

$$\frac{J'_n(n\beta)}{J_n(n\beta)} = u - \frac{1}{\beta}. \tag{94}$$

Кроме того, непосредственно из (62) и (63) имеем

$$\frac{2J'_n(n\beta)}{J_n(n\beta)} = \frac{J_{n-1}(n\beta)}{J_n(n\beta)} - \frac{J_{n+1}(n\beta)}{J_n(n\beta)} \tag{95}$$

и

$$\frac{J_{n-1}(n\beta)}{J_n(n\beta)} + \frac{J_{n+1}(n\beta)}{J_n(n\beta)} = \frac{2}{\beta}. \tag{96}$$

Тогда из (95) и (96) получаем

$$\frac{J'_n(n\beta)}{J_n(n\beta)} = \frac{J_{n-1}(n\beta)}{J_n(n\beta)} - \frac{1}{\beta}. \tag{97}$$

И далее, с учетом соотношений (89) и (77),

$$\frac{J'_n(n\beta)}{J_n(n\beta)} = u - \frac{1}{\beta} = \frac{m_\beta(1-\beta^2)^{1/2}}{\beta}, \tag{98}$$

откуда

$$u = \frac{1 + m_\beta(1-\beta^2)^{1/2}}{\beta}. \tag{99}$$

С учетом (99) равенства (93) и (90) легко преобразовать

$$\frac{J'_{n+1}(n\beta)}{J_{n+1}(n\beta)} = \frac{m_\beta(1-\beta^2)^{1/2}}{\beta} \cdot \frac{1 - \dfrac{(1-\beta^2)^{1/2}}{m_\beta}}{1 - m_\beta(1-\beta^2)^{1/2}} - \frac{1}{n\beta}, \tag{100}$$

$$\frac{J'_{n-1}(n\beta)}{J_{n-1}(n\beta)} = \frac{m_\beta(1-\beta^2)^{1/2}}{\beta} \cdot \frac{1 + \dfrac{(1-\beta^2)^{1/2}}{m_\beta}}{1 + m_\beta(1-\beta^2)^{1/2}} - \frac{1}{n\beta}. \tag{101}$$

Для сопоставления уместно вновь напомнить, что

$$\frac{J'_n(n\beta)}{J_n(n\beta)} = \frac{m_\beta(1-\beta^2)^{1/2}}{\beta}. \tag{102}$$

Кроме того, для функций, порядок которых отличается на единицу, имеем

$$\frac{J'_{n+1}(n\beta)}{J_n(n\beta)} = \frac{1 - m_\beta(1-\beta^2)}{\beta}, \tag{103}$$

$$\frac{J'_{n-1}(n\beta)}{J_n(n\beta)} = \frac{1 + m_\beta(1-\beta^2)}{\beta}. \tag{104}$$

В этих уравнениях бесселевы функции от аргумента порядка n и $n \pm 1$ явно выражены через n, β и m_β — некоторую функцию от β (или n).

Пользуясь соотношениями (98) и (100) — (104), образуем суммы и разности отношений, производных к их функциям

$$\frac{J'_{n+1}(n\beta)}{J_{n+1}(n\beta)} + \frac{J'_{n-1}(n\beta)}{J_{n-1}(n\beta)} = \frac{2m_\beta\beta(1-\beta^2)^{1/2}}{1 - m_\beta^2(1-\beta^2)} - \frac{2}{n\beta}, \tag{105}$$

$$\frac{J'_{n+1}(n\beta)}{J_{n+1}(n\beta)} - \frac{J'_{n-1}(n\beta)}{J_{n-1}(n\beta)} = \frac{2(1-\beta^2)(m_\beta^2 - 1)}{\beta[1 - m_\beta^2(1-\beta^2)]}, \tag{106}$$

$$\frac{J'_n(n\beta)}{J_n(n\beta)} - \frac{J'_{n-1}(n\beta)}{J_{n-1}(n\beta)} = \frac{(1-\beta^2)(m_\beta^2 - 1)}{\beta[1 + m_\beta(1-\beta^2)^{1/2}]} + \frac{1}{n\beta}, \tag{107}$$

$$\frac{J'_{n+1}(n\beta)}{J_{n+1}(n\beta)} - \frac{J'_n(n\beta)}{J_n(n\beta)} = \frac{(1-\beta^2)(m_\beta^2 - 1)}{\beta[1 - m_\beta(1-\beta^2)^{1/2}]} - \frac{}{n\beta}. \tag{108}$$

Из уравнений (107) и (108) следует, что при больших n и β, близких к единице, при изменении порядка функции на единицу отношение производной функции к самой функции изменяется на величину порядка

$$\frac{J'_{n\pm1}(n\beta)}{J_{n\pm1}(n\beta)} - \frac{J'_n(n\beta)}{J_n(n\beta)} = O(1-\beta^2),$$

так как m_β при больших β примерно равно $2^{1/2}$, а $n(1-\beta^2) > 1$. При этом изменение порядка на $(+1)$ вызывает увеличение, а на (-1) — уменьшение этой функции на величины, которые с точностью до членов $O(1-\beta^2)^{3/2}$ и $1/n\beta$ совпадают по абсолютному значению. Действительно, вычитая (108) из (107), имеем

$$\left[\frac{J'_{n-1}(n\beta)}{J_{n-1}(n\beta)} - \frac{J'_n(n\beta)}{J_n(n\beta)}\right] - \left[\frac{J'_n(n\beta)}{J_n(n\beta)} - \frac{J'_{n+1}(n\beta)}{J_{n+1}(n\beta)}\right] = \frac{2m_\beta(m_\beta^2-1)(1-\beta^2)^{3/2}}{\beta[1-m_\beta^2(1-\beta^2)]} - \frac{2}{n\beta}. \tag{109}$$

При $\beta \approx 1$ соотношение (109) имеет порядок разности

$$(1-\beta^2)^{3/2} - \frac{2}{n\beta}. \tag{110}$$

Поэтому при больших значениях n и малых $(1-\beta^2)$ можно в некотором приближении применить интерполяционное соотношение

$$\frac{J'_n(n\beta)}{J_n(n\beta)} \approx \frac{1}{2}\left[\frac{J'_{n+1}(n\beta)}{J_{n+1}(n\beta)} + \frac{J'_{n-1}(n\beta)}{J_{n-1}(n\beta)}\right]. \tag{111}$$

При этом член, которым мы пренебрегаем, будет иметь порядок разности (110).

С помощью (111) можно получить значение m_β, а с ним и все необходимые выражения с указанной точностью. С учетом (102) и (105) можно (111) представить в виде

$$\frac{2m_\beta(1-\beta^2)^{1/2}}{\beta} = \frac{2m_\beta\beta(1-\beta^2)^{1/2}}{1-m_\beta^2(1-\beta^2)} - \frac{2}{n\beta} \tag{112}$$

или

$$m_\beta(1-\beta^2)^{1/2}\left[\frac{1-m_\beta^2(1-\beta^2)-\beta^2}{1-m_\beta^2(1-\beta^2)}\right] = \frac{m_\beta(1-\beta^2)^{3/2}(1-m_\beta^2)}{1-m_\beta^2(1-\beta^2)} = -\frac{1}{n},$$

откуда

$$n\beta = \frac{1-m_\beta^2(1-\beta^2)}{m_\beta(m_\beta^2-1)(1-\beta^2)^{3/2}}. \tag{113}$$

Для номера искомой гармоники уже найдено выражение (79). Сравнивая (113) и (79), имеем

$$1 + m_\beta(1-\beta^2) = \frac{1-m_\beta^2(1-\beta^2)}{m_\beta^2-1} \tag{114}$$

или

$$(1-\beta^2)m_\beta^4 + m_\beta^2 - 2 = 0.$$

Откуда

$$m_\beta^2 = \frac{\pm\sqrt{1+8(1-\beta^2)}-1}{2(1-\beta^2)}. \tag{115}$$

Так как m_β — действительное число, у радикала оставим только знак $+$. Итак

$$m_\beta^2 = \frac{\sqrt{1+8(1-\beta^2)}-1}{2(1-\beta^2)}. \tag{116}$$

В пределе, когда $\beta \to 1$

$$\lim_{\beta\to 1} m_\beta^2 = 2. \tag{117}$$

Из (114) и (79) можно получить еще одно важное соотношение. Перепишем (79) так:

$$n_\beta = \left[\frac{1}{m_\beta} + m_\beta(1-\beta^2)\right] : (1-\beta^2)^{3/2}, \tag{118}$$

а (114) представим в виде

$$\frac{1}{m_\beta} + m_\beta(1-\beta^2) = \frac{2}{m_\beta^3}. \tag{119}$$

Тогда из (118) следует, что

$$n_\beta = \frac{k_\beta}{(1-\beta^2)^{3/2}}, \tag{120}$$

где

$$k_\beta = \frac{2}{m_\beta^3}$$

некоторая монотонная и медленно меняющаяся функция.

Из уравнения (118) с учетом (116) можно получить непосредственно для k_β и такое выражение:

$$k_\beta = \frac{2^{5/2}(1-\beta^2)^{3/2}}{[\sqrt{1+8(1-\beta^2)}-1]^{3/2}}, \tag{121}$$

и, следовательно,

$$n_\beta = \frac{2^{5/2}}{[\sqrt{1+8(1-\beta^2)}-1]^{3/2}}. \tag{122}$$

Можно представить (122) и (121) в другом, пожалуй более удобном для вычисления виде

$$n_\beta = \frac{[1+\sqrt{1+8(1-\beta^2)}]^{3/2}}{4(1-\beta^2)^{3/2}}, \tag{123}$$

$$k_\beta = \frac{[1+\sqrt{1+8(1-\beta^2)}]^{3/2}}{4}. \tag{124}$$

В тождественности (122) и (123) легко убедиться при их сравнении.

Из (124) следует, что при $\beta = 0$ $k_\beta = 2$, при $\beta = 1$ $k_\beta = 2^{-1/2}$. Точка $n = (1-\beta^2)^{-3/2}$ при $k_\beta = 1$ является граничной для условия $k_\beta < 1$ и $k_\beta > 1$, и мы должны рассмотреть либо случай $n < (1-\beta^2)^{-3/2}$, либо $n >$

$> (1 - \beta^2)^{-3/2}$. Поскольку нас интересует ультрарелятивистский случай, выбираем верхнюю область, когда $k_{\beta\max} = 1$, откуда

$$\beta_{\min} = \sqrt{1 - \frac{(2^{4/3} - 1)^2 - 1}{8}} = 0{,}9144725$$

Теперь систему уравнений (60) можно представить в виде

$$\begin{aligned} &\frac{1}{[\sqrt{1 + 8(1 - \beta_1^2)} - 1]^{3/2}} - \frac{1}{[\sqrt{1 + 8(1 - \beta_2^2)} - 1]^{3/2}} = \frac{K_1}{2^{5/2}}, \\ &\frac{\beta_1}{[\sqrt{1 + 8(1 - \beta_1^2)} - 1]^{3/2}} - \frac{\beta_2}{[\sqrt{1 + 8(1 - \beta_2^2)} - 1]^{3/2}} = \frac{2\pi K}{2^{5/2}}. \end{aligned} \tag{125}$$

Прежде чем рассматривать методы решения этой системы, определим точность, которую может обеспечить такое решение. Уравнение (113), полученное нами из рекуррентных соотношений для бесселевых функций при единственном предположении, указанном в (111), и точное выражение (79) для искомой гармоники оказались совместными алгебраически и дали общее решение в виде (123). Вероятность того, что это совпадение случайное, крайне мала. Поэтому представляет интерес выяснить, не свидетельствует ли оно о том, что в частном случае, когда порядок бесселевой функции определяется равенством (79), зависимость (111) удовлетворяется не приближенно, а точно.

Решая (114), мы ограничивались действительной областью решений. Между тем легко видеть, что уравнения

$$n_\beta = \frac{1 - m_\beta^2 (1 - \beta^2)}{m_\beta (m_\beta^2 - 1)(1 - \beta^2)^{3/2}} \tag{I}$$

и

$$n_\beta = \frac{1 + m_\beta^2 (1 - \beta^2)}{m_\beta (1 - \beta^2)^{3/2}} \tag{II}$$

совместны в действительной области значений m_β не для всех β.

Чтобы найти $\beta_{\min}$, при котором m_β будет вещественным, перепишем (I) в виде

$$n_\beta = \frac{1}{m_\beta (1 - \beta^2)^{3/2}} \left(\frac{m_\beta^2 \beta^2}{m_\beta^2 - 1} - 1 \right). \tag{126}$$

Так как $n_\beta > 0$ и $m_\beta (1 - \beta^2)^{3/2} > 0$, то должно быть $\left(\frac{m_\beta^2 \beta^2}{m_\beta^2 - 1} - 1 \right) > 0$, откуда $\beta^2 > \left(1 - \frac{1}{m_\beta^2}\right)$. С учетом (II) имеем $\sqrt{1 + 8(1 - \beta^2)} < 3$, т. е. $\beta > 0$. Никаких других ограничений нет.

Таким образом (I) и (II) совместны во всей действительной области значений $\beta > 0$, а в точке $\beta = 0$ имеется особенность. Это свидетельствует о том, что уравнение (113) и, следовательно, соотношение (111) строго совпадают в области значений $0 < \beta \leqslant 1$ при условии, что одновременно имеет место равенство (79).

Теперь, зная область применимости и точность системы уравнений (125), можно приступить к ее решению.

Сначала определим число возможных решений системы относительно β_1 и β_2 в интервале

$$0{,}914 < \beta_2 < \beta_1 \leqslant 1. \tag{127}$$

Можно показать, что в этом интервале система имеет только единственное решение.

Действительно, представим систему (125) в виде

$$\text{I}'. \qquad F_1 = \frac{x}{[\sqrt{1+8(1-x^2)}-1]^{3/2}} - \frac{y}{[\sqrt{1+8(1-y^2)}-1]^{3/2}} = a, \tag{128}$$

$$\text{II}'. \qquad F_2 = \frac{1}{[\sqrt{1+8(1-x^2)}-1]^{3/2}} - \frac{1}{[\sqrt{1+8(1-y^2)}-1]^{3/2}} = b, \tag{129}$$

и найдем ее решение в области (127).

Рассмотрим (I′) и (II′) как уравнения двух семейств кривых в одной области при различных значениях параметров a и b. Наше утверждение будет доказано, если мы покажем, что в каждой точке данной области производная $dy_{\text{I}'}/dx$, определенная для семейства I′, будет всегда больше (или меньше), чем для семейства II′ кривых рассматриваемой системы уравнений.

Найдем отношение производных

$$\frac{dy_{\text{I}'}}{dx} : \frac{dy_{\text{II}'}}{dx} = \frac{9+4x^2-\sqrt{1+8(1-x^2)}}{x} : \frac{9+4y^2-\sqrt{1+8(1-y^2)}}{y}.$$

Проанализировав функцию $f(\beta)$ (x или y), получим

$$f(\beta) = \frac{9+4\beta^2-\sqrt{1+8(1-\beta^2)}}{\beta},$$
$$f'(\beta) = -\frac{9}{\beta^2} + 4 + \frac{9}{\beta^2\sqrt{9-8\beta^2}}. \tag{130}$$

Легко видеть, что во всем рассматриваемом интервале (127) $f'(\beta) > 0$, т. е. $f(\beta)$ монотонно возрастает. Так как $x > y$, то $f(x) > f(y)$. Функция $f(y)$ также монотонно возрастает, так как имеет тот же вид, что и $f(x)$. Следовательно, $\frac{f(x)}{f(y)} > 1$ или $\frac{dy_{\text{I}'}}{dx} > \frac{dy_{\text{II}'}}{dx}$ во всей рассматриваемой области значений x и y, что и требовалось доказать. Таким образом, в интересующей нас области система уравнений (125) имеет только одно решение.

Для нахождения его определим приближенные значения n_1 и n_2, разложив подкоренное выражение в (123) в ряд и удержав два первых члена этого разложения

$$n_1 = \frac{[1+\sqrt{1+8(1-x^2)}]^{3/2}}{4(1-x^2)^{3/2}} \approx \frac{[2+4(1-x^2)]^{3/2}}{4(1-x^2)^{3/2}} \approx$$
$$\approx \frac{1+3(1-x^2)}{2^{1/2}(1-x^2)^{3/2}} = \frac{1}{2^{1/2}(1-x^2)^{3/2}} + \frac{3}{2^{1/2}(1-x^2)^{1/2}}, \tag{131}$$

$$n_2 \approx \frac{1}{2^{1/2}(1-y^2)^{3/2}} + \frac{3}{2^{1/2}(1-y^2)^{1/2}}. \tag{132}$$

Тогда система уравнений

$$\left.\begin{aligned} n_1 - n_2 &= K_1 \\ xn_1 - yn_2 &= 2\pi K \end{aligned}\right\} \tag{133}$$

примет вид

$$\left.\begin{aligned} \left[\frac{1}{(1-x^2)^{3/2}} - \frac{1}{(1-y^2)^{3/2}}\right] + 3\left[\frac{1}{(1-x^2)^{1/2}} - \frac{1}{(1-y^2)^{1/2}}\right] &\approx \sqrt{2}\,K_1, \\ \left[\frac{x}{(1-x^2)^{3/2}} - \frac{y}{(1-y^2)^{3/2}}\right] + 3\left[\frac{x}{(1-x^2)^{1/2}} - \frac{y}{(1-y^2)^{1/2}}\right] &\approx \sqrt{2}\,2\pi K. \end{aligned}\right\} \tag{134}$$

Решая эту систему, получим

$$(1-x^2)^{1/2} \approx \frac{2}{\sqrt{\frac{2}{3\left(1-\frac{2\pi K}{K_1}\right)} - \frac{26}{3}K_1\left(1-\frac{2\pi K}{K_1}\right)^2 + 4 + \sqrt{2}K_1\left(1-\frac{2\pi K}{K_1}\right)}}, \quad (135)$$

$$(1-y^2)^{1/2} \approx \frac{2}{\sqrt{\frac{2}{3\left(1-\frac{2\pi K}{K_1}\right)} - \frac{26}{3}K_1^2\left(1-\frac{2\pi K}{K_1}\right)^2 + 4 - \sqrt{2}K_1\left(1-\frac{2\pi K}{K_1}\right)}}. \quad (136)$$

Подставляя в (131) и (132) значения $(1-x^2)$ и $(1-y^2)$ из (135) и (136), можно вычислить значения n_1 и n_2.

Итак, значения основных внутренних параметров системы: скорости β_1 и β_2; номера критических гармоник n_1 и n_2 и (с учетом (51) и, следовательно, значение R_1/R_2 и отношение расстояния между круговыми токами l к радиусу $\frac{l}{R_1} = \frac{R_1 - R_2}{R_1} = 1 - \frac{R_2}{R_1}$ — являются однозначными функциями целочисленных параметров K и K_1. О параметрах нам известно только то, что это целые числа, которые должны удовлетворять рассматриваемой системе уравнений.

Из (135) и (136) видно, что в интервале

$$0{,}914 < y < x < 1 \quad (137)$$

условие единственности y и x при данных K и K_1 требует однозначной связи также между самими параметрами K и K_1. Действительно, если задаться некоторым целым K_1, то значение K не может варьироваться, так как при изменении K даже на единицу при фиксированном K_1 нарушается либо условие (137), либо условие однозначности решения при данном значении параметров.

Таким образом, между параметрами K и K_1 существует однозначная связь. Данному значению K_1 соответствует одно и только одно значение K.

Физический смысл этого математического вывода достаточно нагляден. Параметр K_1 есть функция критических номеров гармоник ($K_1 = n_1 - n_2$), а K означает число длин волн, одинаковых для обеих гармоник, размещающихся в интервале $R_1 - R_2$. Понятно, что если известна разность между номерами гармоник, создающих одинаковую длину волны, то это значит, что расстояние между радиусами $R_1 - R_2$ фиксировано, а на одном и том же участке никак не может уложиться разное число длин волн, образованных обеими системами зарядов. Следовательно, $K = (R_1 - R_2)/\lambda$ при заданном K_1 должно иметь только одно значение. Итак, нахождение целочисленных параметров K и K_1 сводится к определению одного из них.

Чтобы найти все возможные решения системы (134), можно в качестве возможных значений, например, параметра K рассмотреть ряд натуральных чисел, начиная от единицы. Такой способ дает, конечно, правильный результат, но очень трудоемок даже при использовании электронной вычислительной машины. Однако есть возможность резко уменьшить число рассматриваемых значений K, если обратить внимание на то, что при $\beta \to 1$

$$\frac{K_1}{K}\Big|_{\beta \to 1} \to 2\pi. \quad (138)$$

Условие (138) выполняется тем точнее, чем ближе β к единице.

Легко видеть, что условию (138) удовлетворяют не любые пары чисел, а строго определенные. Например, если $K = 7$, то только при $K_1 = 44$ наилучшим образом удовлетворяется условие (138). Простой подстановкой легко убедиться в том, что значения K от 1 до 6 включительно вообще не дают решения (125), так как для них нельзя подобрать такие целочисленные значения K_1, при которых выполнялось бы условие (137). В то же время значения величин K и K_1, кратные, например, соответственно 7 и 44, т. е. 14 и 88; 21 и 132 и т. д., дают решения. Однако по мере возрастания абсолютной величины K при некотором максимальном ее значении решения опять нет. Последнее значение K, которое в этом ряду чисел, кратных семи, даст решение системы в действительной области, равно $K_{\max} = 7 \cdot 112 = 784$.

Таким образом, значения $K = 7$ и $K_1 = 44$ и кратные им составляют некоторый ряд возможных решений системы уравнений.

Из (135) и (136) также легко видеть, что при постоянном $K_1/2\pi K$ бóльшим значениям K должно соответствовать большее значение x, но меньшее значение y. Если же отношение $K_1/2\pi K$ меняется, то для получения большего значения, чем ранее найденное, надо, чтобы K_1/K в последующем случае было ближе к 2π, чем в предыдущем.

Отсюда, с учетом доказанной ранее однозначности решения и явной монотонности зависимости x и y от K, прямо следует, что последующий ряд чисел K и K_1, которые могут дать решение системы, должен образовываться другой парой целых чисел, которые удовлетворяют условию

$$\left[\left(\frac{K_1}{K}\right)_{\mathrm{I}} - 2\pi\right] > \left[\left(\frac{K_1}{K}\right)_{\mathrm{II}} - 2\pi\right]. \tag{139}$$

Этому условию после 44/7 удовлетворяет только пара чисел 710/113 и кратные им числа. Действительно,

$$1 - \frac{2\pi \cdot 7}{44} = 4{,}02 \ldots 10^{-4}, \quad \text{а} \quad 1 - \frac{2\pi \cdot 113}{710} = 8{,}49 \ldots 10^{-8}.$$

Между $K = 7$ ($K_1 = 44$) и $K = 113$ ($K_1 = 710$) нет пар чисел, которые удовлетворяли бы (139) лучше, чем 113 и 710. Эти же числа составляют опять конечный ряд кратных значений, дающий решения системы (134).

Таким образом, нахождение чисел, дающих решения системы уравнений, сводится к отысканию целых чисел, отношения которых наилучшим образом удовлетворяют соотношениям (138) и (139). Причем эти условия должны удовлетворяться при наименьшем значении K. Это правило позволило с помощью несложных приемов отыскать значения пар целых чисел, которые могут быть использованы в качестве параметров, соответствующих решению системы уравнений (табл. 2).

Мы получили, таким образом, весьма примечательный результат, согласно которому фазовым и частотным условиям неизлучения удовлетворяет только дискретный ряд состояний, характеризуемый определенными парами скоростей вращения зарядов по окружности.

Существенно отметить, что дискретными являются не только скорости вращения, но и соответствующие им номера гармоник и отношения радиусов, так как из (51) и (54) следует, что

$$\frac{R_2}{R_1} = 1 - \frac{2\pi K}{\beta_1 n_1} = \frac{1}{1 + \dfrac{2\pi K}{n_2 \beta_2}}, \tag{140}$$

а n_1 и n_2 однозначно определяются из β_1 и β_2 по уравнению (61).

Таблица 2

Первые значения параметров K и K_1 для десяти рядов частиц, которые могут принципиально существовать в основных и виртуальных состояниях

Ряд	K_p	K_{1p}	$A = 1 - \frac{2\pi K}{K_1}$
1	7	44	$4{,}023 \cdot 10^{-5}$
2	113	710	$8{,}491 \cdot 10^{-8}$
3	33 215	208 696	$1{,}056 \cdot 10^{-10}$
4	99 532	625 378	$9{,}277 \cdot 10^{-12}$
5	364 913	2 292 816	$5{,}127 \cdot 10^{-13}$
6	1 725 033	10 838 702	$7{,}049 \cdot 10^{-15}$
7	131 002 976	823 115 974	$6{,}164 \cdot 10^{-18}$
8	811 528 438	5 098 983 558	$1{,}755 \cdot 10^{-19}$
9	44 485 467 702 853	279 510 437 053 578	$5{,}128 \cdot 10^{-29}$
10	136 876 735 467 187 340	860 021 893 182 138 486	$2{,}756 \cdot 10^{-36}$

Легко убедиться в том, что число членов в каждом ряду не может превышать значения, численно равного первому значению K в последующем ряду. На самом деле, если, например, допустить, что в первом ряду возможных значений K есть член с № 113, то его K равен $113 \cdot 7 = 791$, но точно таким же будет K в седьмой по порядку точке второго ряда.

Как было показано, уравнения электродинамической устойчивости имеют только одно решение, и в первом ряду должно быть 112 членов, а член 113 может характеризовать лишь некоторое метастабильное состояние, соответствующее переходу из первого ряда возможных состояний ко второму.

Поэтому номер последнего члена в каждом ряду констант, определяющих все возможные состояния ЭЧ, определяется таким простым равенством:

$$N_{\max}(NS) = K_p(NS + 1), \tag{141}$$

где NS — номер ряда.

С учетом изложенного структуру ЭЧ можно описать уже детальнее (рис. 1, см. также рис. 2). В первом подпространстве частица изображена в виде точки, находящейся в центре сферы Шварцшильда радиуса R_1. Внутри сферы существует структура ЭЧ, для описания которой надо перейти во второе подпространство. В последнем имеется система двух дискретных соосных круговых токов, на которых при выполнении условий устойчивости регулярно расположены субзаряды; число их на наружной и внутренней окружностях n_1 и n_2 должно определяться в теории. Расчет должен ответить также на вопрос о том, одинаковая ли у них частота вращения. Нет оснований считать, что радиусы R_1 и R_2 и число субзарядов n_1 и n_2 во втором подпространстве должны совпадать с теми параметрами, которые были определены нами из условий неизлучения. Условия неизлучения дают информацию о том, как должны отобразиться на свойствах ЭЧ первого подпространства свойства субчастиц, которые наблюдаются во втором. Все это должно выразиться в расчете и не может быть заранее постулировано.

В третьем подпространстве у всех ЭЧ имеется всего две субчастицы: на наружной и внутренней окружностях. В ЭЧВ, представляющих собой соединение двух ЭЧ — частицы и античастицы, имеется по две частицы на каж-

дой окружности, но с разными знаками зарядов. Эти субчастицы движутся по окружностям, но уже в третьем подпространстве (в первом и во втором они в черной дыре) со скоростями, намного превышающими скорость света. Соотношение скоростей и радиусов для субчастиц, наблюдаемых во втором и третьем подпространствах, должно определяться из расчета. Вопрос о том, почему при переходе из второго подпространства в третье меняется число субчастиц, должен быть рассмотрен особо. Ввиду важности его при выяснении структуры ЭЧ и ЭЧВ мы ознакомимся с этим эффектом, который, по-видимому, уместнее всего назвать «тахионным» [12] (от слова тахион, обозначающего сейчас сверхсветовые частицы), хотя этот вопрос относится к методике расчета параметров частиц.

Из электродинамики известно, что заряды, движущиеся релятивистски, деформируют образованное ими электрическое поле так, что оно существенно зависит от угла θ между радиусом-вектором и направлением скорости движения частицы:

$$|E| = \frac{q(1-\beta_{(3)}^2)}{R^2(1-\beta_{(3)}^2\sin^2\theta)^{3/2}}. \qquad (142)$$

Эта зависимость верна как для равномерно и прямолинейно движущегося заряда, так и для статической составляющей поля заряда, движущегося с как угодно меняющимся вектором скорости. В нашей модели ЭЧ волновая составляющая поля скомпенсирована и интерес представляет только статическое поле. Поэтому приведенная формула применима и в этом случае.

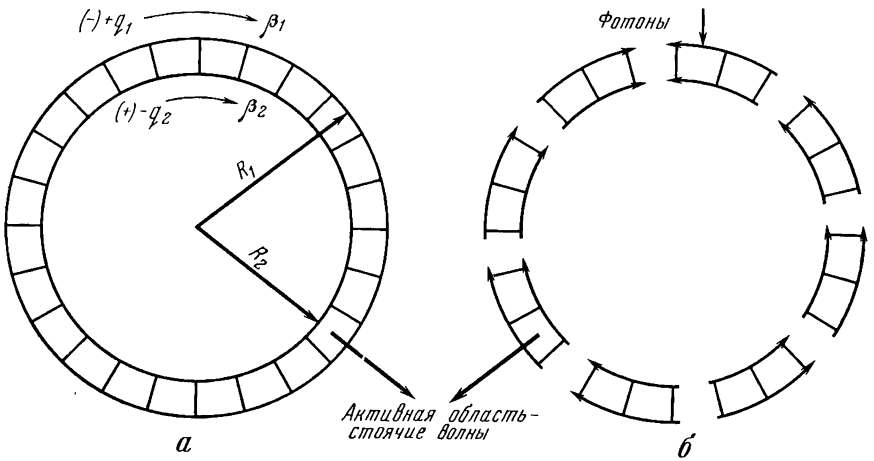


Рис. 2. Условная аналогия между моделью частиц в ТФП (*а*) и геоном Уиллера (*б*)

Легко видеть, что если $\beta^2 > 1$, то при определенных углах подкоренное выражение становится отрицательным, а следовательно, во втором и первом подпространствах, где скорость распространения любого сигнала не может быть больше c, поля вовсе не будет. Если $\beta^{(3)}$ — целое число, то за один оборот движущегося в третьем подпространстве тахиона во втором подпространстве возникнет $\beta^{(3)}$ сигналов о прохождении частицы. Поскольку скорость движения тахиона в n раз больше c, то один тахион будет восприниматься во втором подпространстве и при отображении на первое как система из n частиц, движущихся со скоростью $\beta^{(2)} = \beta^{(3)}/n$.

Это и есть «тахионный» эффект, играющий большую роль в формировании структуры частиц и ее свойств.

Мы говорили о структуре частиц как о дискретных образованиях, локализованных в определенном объеме. Однако частица — это проявление локальных свойств поля. Сила инерции фундаментального поля, связанного с частицей, а следовательно, и мера инерции — масса частицы — проявляются локально только в центре черных дыр структуры ЭЧ и ЭЧВ в центре симметрии поля. Эти точки концентрации сил инерции и относятся к дискретной части всех трех подпространств — к подпространствам M_1, M_2, M_3, а в континуальной части этих подпространств расположено само поле, т. е. заряд и масса, с одной стороны, и поле — с другой: две стороны структуры ЭЧ и ЭЧВ, два д о п о л н и т е л ь н ы х один к другому способа описания этих физических объектов. В этом и состоит чисто физическая сущность «принципа дополнительности», гениально угаданного Бором. О математической стороне этого принципа мы уже говорили.

Опишем теперь полевую структуру ЭЧ и ЭЧВ. Уже в [7] было указано, что фундаментальное поле характеризуется не кулоновым потенциалом $\varphi(r) = q/r$, а потенциалом вида

$$\varphi(r) = q\frac{e^{-R/r}}{r}, \tag{143}$$

где R — постоянная величина.

Вывод этого потенциала в [7] дан не был. Покажем, что в ТФП кулоново взаимодействие в абсолютно пустом пространстве переходит во взаимодействие, характеризуемое потенциалом (143), который мы далее будем называть потенциалом фундаментального поля (ПФП).

Известно [56], что конформное отображение одного пространства на другое имеет вид

$$g^{(\tilde{i})}_{ik} = e^{f(x)}g_{ik}. \tag{144}$$

Рассматривая потенциал Кулона как отображение вакуумного пространства на евклидово, получим

$$\varphi_{\tilde{i}} = \frac{q_{\tilde{i}}}{r}e^{-R/r}. \tag{145}$$

Значение константы R должно быть найдено в теории из условий внутреннего самосогласования в ней. Такое самосогласование возникает из решения (15), если положить, что R — радиус сферы Шварцшильда.

$$\varphi_{\tilde{i}} = \frac{q_{\tilde{i}}}{r}e^{-\frac{R_{\tilde{i}}}{r}}. \tag{146}$$

Тогда поле, создаваемое этим потенциалом, будет

$$\vec{E} = -\operatorname{grad}\varphi = q\frac{e^{-R/r}}{r^2}\left(1-\frac{R}{r}\right)\frac{\vec{r}}{r}. \tag{147}$$

Легко видеть, что $E = 0$ при $r = 0$, $r = R$, $r = \infty$. Это соответствует такому распределению плотности заряда в пространстве:

$$\rho = \frac{\operatorname{div}\vec{E}}{4\pi} = \frac{q}{4\pi}\frac{Re^{-R/r}}{r^4}\left(2-\frac{R}{r}\right); \tag{148}$$

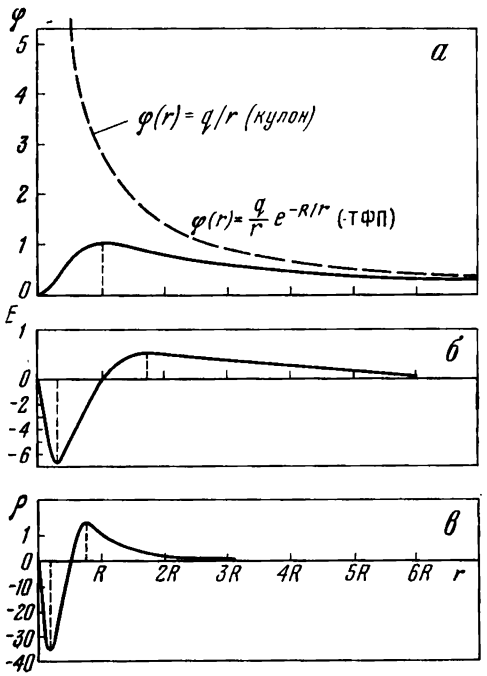


Рис. 3. Графики потенциалов и определяемых из них величин для первого подпространства

а — по формуле (146);
б — по формуле (147);
в — по формуле (148)

следовательно, $\rho = 0$ при $r = 0$; $r = R/2$; $r = \infty$;

$$\rho = \rho_+ - \rho_- = \frac{2qe^{-R/r}R}{4\pi r^4} - \frac{qe^{-R/r}R^2}{4\pi r^5}. \quad (149)$$

Заряд, образуемый этим распределением внутри сферы с радиусом $r = r_0$, будет

$$Q = \int_0^{r_0} \rho\, dv = qe^{-R/r_0}\left(1 - \frac{R}{r_0}\right), \quad (150)$$

а во всем пространстве

$$\int_0^{\infty} \rho\, dv = q. \quad (151)$$

Таким образом, в ТФП нет точечного заряда при полевом рассмотрении ЭЧ. А роль константы с размерностью заряда играет интеграл от плотности заряда по всему пространству. При «частичном» рассмотрении, наоборот, есть заряд в точке, но при этом потенциал фундаментального поля (ПФП) вырождается в кулонов, т. е. «заряд» в данной точке есть отображение распределения плотности заряда во всем пространстве.

На рис. 3 показан вид распределения φ, E и ρ в пространстве.

Найдем энергию поля U, которую оно создает во всем пространстве

$$U = \int_0^{\infty} \frac{E^2}{8\pi}\, dv = \frac{q^2}{2}\int_0^{\infty}\left(1 - \frac{R}{r}\right)^2 \frac{e^{-2R/r}}{r^2}\, dr = \frac{q^2}{8R}. \quad (152)$$

Указанные формулы записаны для зарядов фундаментального поля. Понятно, что общий потенциал, создаваемый наружным и внутренним зарядами фундаментального поля с учетом того, что они всегда имеют разный знак, будет

$$\varphi_{1,2} = \frac{q_1 e^{-R_1/r}}{r} - \frac{q_2 e^{-R_2/r}}{r}. \quad (153)$$

Следовательно,

$$E_{1,2} = \frac{1}{r^2}\left[q_1\left(\frac{R_1}{r} - 1\right)e^{-R_1/r} - q_2\left(\frac{R_2}{r} - 1\right)e^{-R_2/r}\right] \quad (154)$$

и

$$U_{1,2} = \frac{1}{8\pi}\int_0^{\infty} E_{1,2}^2\, dv = \frac{q_1^2}{8R_1}\left[1 + \frac{q_2^2}{q_1^2}\frac{R_1}{R_2} - \frac{16R_2q_2}{R_1q_1\left(1 + \frac{R_2}{R_1}\right)^3}\right]. \quad (155)$$

При $R_1 = R_2$ $U_{1,2}$ переходит в $(q_1 - q_2)^2/8R$, как и должно быть.

Таким образом, заряды, поля и энергии, создаваемые фундаментальным полем, не имеют расходимостей ни в одной точке пространства, ни интегрально во всем пространстве.

Такова структура частиц. Она заметно отличается от того, что принято понимать под словом «структура» в существующих классических и квантовых теориях.

Методика расчета основных свойств и параметров элементарных частиц

Условие синхронности и противофазности, которое могло бы возникнуть при отсутствии взаимной компенсации и гашения излучения частиц во втором подпространстве, приводит к зависимостям

$$\frac{R_1}{R_2} = \frac{\beta_1 n_1}{\beta_2 n_2}, \tag{156}$$

$$R_1 - R_2 = K\lambda, \tag{157}$$

$$\lambda = \frac{2\pi R_1}{\beta_1 n_1} = \frac{2\pi R_2}{\beta_2 n_2}, \tag{158}$$

$$n_1\beta_1 - n_2\beta_2 = 2\pi K. \tag{159}$$

Для удобства последующих расчетов введем обозначение

$$n_1 - n_2 = K_1, \tag{160}$$

где R_1, R_2 — радиусы; β_1, β_2 — линейные скорости вращения; n_1, n_2 — число «сгустков» — субчастиц на наружной и внутренней окружностях, вдоль которых сконцентрирована вся плотность тока, создаваемая фундаментальными зарядами.

Поскольку $n_{1,2}$ численно совпадает с номером гармоники, на которой субчастицы могут излучать максимум энергии,

$$n_1 = \frac{\beta_1 \dfrac{J'_{n_1}(n_1\beta_1)}{J_{n_1}(n_1\beta_1)} + \beta_1^{-1}\dfrac{J_{n_1}(n_1\beta_1)}{J'_{n_1}(n_1\beta_1)}}{1-\beta_1^2}, \tag{161}$$

$$n_2 = \frac{\beta_2 \dfrac{J'_{n_2}(n_2\beta_2)}{J_{n_2}(n_2\beta_2)} + \beta_2^{-1}\dfrac{J_{n_2}(n_2\beta_2)}{J'_{n_2}(n_2\beta_2)}}{1-\beta_2^2}. \tag{162}$$

Или с учетом весьма точной зависимости (102), найденной для $J_n(n\beta)/J'_n(n\beta)$, можно записать более удобные для расчета выражения [1]

$$n_1 = \frac{[1 + \sqrt{1 + 8(1-\bar{\beta}_1^2)}]^{3/2}}{4(1-\bar{\beta}_1^2)^{3/2}}, \tag{163}$$

$$n_2 = \frac{[1 + \sqrt{1 + 8(1-\bar{\beta}_2^2)}]^{3/2}}{4(1-\bar{\beta}_2^2)^{3/2}}. \tag{163а}$$

[1] Черточка, поставленная над β, связана с различием β и $\bar{\beta}$ по соотношению неопределенности.

Уравнения (159), (160), (163) могут быть решены совместно, если известны значения целых чисел K и K_1. Поскольку скорости β_1 и β_2 близки к единице, между K и K_1 для выполнения (159) и (160) должно соблюдаться условие

$$K_1 = 2\,[\varepsilon(\pi K + 1)], \tag{164}$$

которое позволяет найти K_1 из K. Таким образом, все безразмерные внутренние параметры частиц $\beta_{1,2}$, $n_{1,2}$, $R_{1,2}/R_{2,1}$ могут быть определены из уравнений (156), (159), (160), (163) как функции целочисленного параметра K. В ТФП последний именуется «фундаментальным квантовым параметром».

Совместное решение системы упомянутых пяти уравнений с достаточно большой точностью возможно далеко не при любых целых значениях K. Кроме условия совместимости указанных уравнений на выбор K влияют различия в особенностях трех уровней элементарности [9]. Физический смысл этого условия таков: среднее число субчастиц, расположенных в виде сгустков плотности тока вдоль токовых шнуров, соответствует среднему числу стоячих волн на этих окружностях (сгустки расположены в узлах стоячих волн). Излучение, погашенное интерференцией, исходно направлено вдоль вектора скорости движения субчастиц. В лабораторной системе координат при скоростях движения, близких к скорости света, с учетом дисперсии в вакууме излучение представляется идущим точно вдоль радиуса. Понятно, что стоячие волны, образовавшиеся при наложении излучений с внутренней и наружной окружностей, расположены вдоль радиуса в интервале, равном $R_1 - R_2$. Из (157) следует, что число этих волн равно K.

В теории масса частиц только полевая. Поэтому как мера инерции субчастиц масса связана с погашенным излучением и принципиально не может наблюдаться в системе координат, где нет никаких следов этого излучения. Это и есть та, давно предсказанная теорией относительности «продольная масса», которую весьма некорректным образом «устранили».

Мы уже отмечали, что в ТФП продольная масса — это масса объекта во втором пространстве [6]. В первом подпространстве наблюдается только поперечная масса, а разность между продольными массами вносит вклад в энергию связи элементов структуры элементарной частицы.

Понятно, что максимальное число поперечных стоячих волн должно составлять такую часть от продольных, которая не превышала бы соответствующей части поперечной массы от продольной,

$$\frac{K}{n} < \frac{m_\perp}{m_\parallel} = (1 - \beta^2). \tag{165}$$

Беря для равенства верхний предел, получим

$$\frac{K^2}{n^2} \leqslant 2^{1/2}(1 - \beta^2)^2.$$

Так как $n^2 \approx \frac{1}{2(1-\beta^2)^3}$ и $(1 - \beta^2) \approx 6\left(1 - \frac{2\pi K}{K_1}\right)$, (165) принимает вид

$$6\sqrt{2}\left(1 - \frac{2\pi K}{K_1}\right) \leqslant K^{-2}. \tag{166}$$

Этот критерий сильно ограничивает число возможных значений K.

При расчете параметров частиц необходимо учесть еще один ограничительный критерий, которого требует принцип соответствия. Все приведенные формулы выполнены по законам классической, не квантовой теории. Понятно, что они справедливы только с той точностью, с какой допустимо

это квазиклассическое приближение. Еще в 1962 г. академик И. Е. Тамм обратил внимание автора на необходимость согласования возможной неточности классических решений с соотношением неопределенности. Вскоре эта задача была нами решена и привела к дополнительному математическому критерию выбора правильных решений.

Сущность полученного решения такова. Если ограничиться небольшим числом знаков, то рассматриваемая система уравнений имеет совместные корни. Однако при увеличении точности определяемых величин выясняется, что абсолютной совместимости — нет. Они не имеют общих решений, точность определения которых заранее не ограничена. Так как по физическому смыслу целочисленные параметры $n_{1,\,2}$, K и K_1 должны быть определены точно, то неполнота совместимости уравнений должна быть отнесена к значениям β_1 и β_2. Она выражается в том, что $\bar{\beta}_1$ и $\bar{\beta}_2$, определенные из (163), не совпадают по своим значениям начиная с некоторого знака, характеризующего неточность совместимости уравнений, с β_1 и β_2.

Таким образом, между $\bar{\beta}_1$ и $\bar{\beta}_2$, определенными из (163), и β_1 и β_2, соответствующим выражениям (159) и (60), должно быть некоторое различие

$$(1-\beta_2)-(1-\bar{\beta}_2)=(1-\bar{\beta}_1)-(1-\beta_1)=F>0. \tag{167}$$

В то же время при определении этих скоростей должно иметь место такое соотношение неопределенности:

$$\Delta x_1\Delta\beta_1\geqslant\frac{\hbar_i}{mc},\quad \Delta x_2\Delta\beta_2\geqslant\frac{\hbar_i}{mc}. \tag{168}$$

Поскольку в ТФП между $\hbar_i$ и $\hbar$ существует зависимость

$$\hbar_i=\frac{\hbar}{1+\dfrac{U_i}{mc^2}} \tag{169}$$

и

$$\frac{U_i}{mc^2}=\frac{8n^2}{K(1+t_\nu)}-1, \tag{170}$$

то можно записать

$$\hbar_i\approx\frac{K(1+t_\nu)}{8n^2}\hbar. \tag{171}$$

А так как

$$m\approx\frac{2s\hbar}{Rc};\quad n^2\approx\frac{1}{2(1-\beta^2)^3};\quad \Delta x=R, \tag{172}$$

то

$$\Delta\beta_{1,2}\geqslant\frac{K(1-\beta_{1,2}^2)^3}{8s}(1+t_\nu), \tag{173}$$

где

$$\begin{aligned} s&=\frac{3n_1^2(1-\beta_1^2)^2\beta_1}{2(1+\beta_1)^2\pi K}\left[1+\frac{n_2\beta_2(1-\beta_1^2)\varepsilon_1}{n_1\beta_1(1-\beta_2^2)}(1+t_\nu)\right];\\ t_\nu&=\frac{nK_1\left[(1-\beta_1)-\left(1-\dfrac{2\pi K}{K_1}\right)\right]}{2\pi n_2 n_1(1-\beta_1^2)^{3/2}}. \end{aligned} \tag{174}$$

Понятно, что неточность в классическом расчете должна по порядку величины совпадать с неточностью, которая требуется соотношением неопределенности, с тем, чтобы ошибку в расчете можно было трактовать как необходимость учета квантовых поправок. Следовательно, должно иметь место неравенство

$$\Delta\beta_{1,2\,\min} \leqslant F \leqslant \Delta\beta_{1,2\,\max}; \tag{175}$$

иначе

$$\frac{K(1-\beta_{1,2}^2)^3}{24s} \leqslant F \leqslant \frac{3K(1-\beta_{1,2}^2)^3}{8s}. \tag{176}$$

Условие (176) обязательно должно выполняться для всех состояний элементарных частиц. Понятно, что это накладывает дополнительные ограничения на число возможных состояний.

Таким образом, полная система уравнений, из которых могут определиться все внутренние параметры частиц, удовлетворяющие уравнениям фундаментального поля и ограниченные только условиями неизлучения, составится из следующих уравнений и неравенств, которые мы для удобства использования выпишем вместе.

$$\begin{aligned}
&1)\quad n_1\beta_1 - n_2\beta_2 = 2\pi K,\\
&2)\quad n_1 - n_2 = K_1,\\
&3)\quad K_1 = 2\,[\varepsilon(\pi K) + 1],\\
&4)\quad (1-\bar{\beta}_1^2) = \frac{1}{2}\left(\frac{2}{n_1}\right)^{2/3}\left[1+\left(\frac{2}{n_1}\right)^{2/3}\right],\\
&5)\quad (1-\bar{\beta}_2^2) = \frac{1}{2}\left(\frac{2}{n_2}\right)^{2/3}\left[1+\left(\frac{2}{n_2}\right)^{2/3}\right],\\
&6)\quad (1-\bar{\beta}_1) - (1-\beta_1) = (1-\beta_2) - (1-\bar{\beta}_2) = F > 0,\\
&7)\quad F(n+1) < 0 \leqslant F(n) < F(n-1).
\end{aligned} \tag{177}$$

Как уже отмечалось, числа K, удовлетворяющие совместности системы уравнений, образуют ряды, в каждом из которых $K_1/K = \text{const}$ и K и K_1 кратны K_p и K_{1p}. Внутри этих рядов требование минимальности F приводит к новому дополнительному условию при вычислении параметров, которые соответствуют кратному значению одного из ранее вычисленных K, если при этом у кратных значений не изменилось отношение K_1/K.

Если внутренние параметры, соответствующие первому значению в каждом ряду, снабдить индексом p (prim), для частиц данного ряда будут иметь место такие зависимости:

$$n = \frac{n_1+n_2}{2} = \left(\frac{n_1+n_2}{2}\right)_p = \text{const}, \tag{178}$$

(так как суммарное число субчастиц всех состояний данного ряда остается неизменным).

С использованием среднего значения n удобно определять n_1 и n_2 по формулам

$$n_1 = n + \frac{K_1}{2}; \quad n_2 = n - \frac{K_1}{2}. \tag{179}$$

Для средней скорости получаются аналогичные зависимости

$$\beta = \frac{\beta_1 + \beta_2}{2} = \left(\frac{\beta_1 + \beta_2}{2}\right)_p = \text{const} \tag{180}$$

и соответственно

$$\beta_1 = \beta + \Delta\beta, \tag{181}$$

$$\beta_2 = \beta - \Delta\beta. \tag{182}$$

Для нахождения величины $\Delta\beta$ удобно пользоваться соотношением

$$\Delta\beta = \frac{K_{1p}\left[(1-\beta) - \left(1 - \frac{2\pi K}{K_1}\right)\right]}{2n}, \tag{183}$$

где $(1 - \beta)$ получено из (180).

Приведенные формулы позволяют определить параметры всех мыслимых состояний независимо от времени их возможного существования. Они дают много меньше состояний, нежели формулы, опубликованные ранее, однако их оказывается еще слишком много. В [8] опубликован новый критерий отбора, оставляющий только элементарные частицы, наблюдаемые в экспериментах, подобных тем, которые сейчас приводят к «рождению» частиц. Здесь мы выведем эти формулы и рассмотрим, как их надо использовать при вычислении параметров частиц.

Глава 4

РАСЧЕТ ПАРАМЕТРОВ ЧАСТИЦ

Определение величины зарядов частиц

При выводе предыдущих уравнений не было использовано амплитудное условие гашения излучения, которое определяет отношение зарядов на наружном и внутреннем круговых токах. Требование равенства амплитуд соответствующих излучений приводит к следующим формулам:

для частиц

$$W_1 f_1(t) = W_2 f_2(t)\,^*, \tag{184}$$

$$W_1 T + W_1 \frac{R_1 - R_2}{c} = W_2 T, \tag{185}$$

где $T = \frac{1}{\nu}$;

для античастиц

$$W_1 f_2(t) = W_2 f_1(t), \tag{186}$$

$$W_1 T = W_2 T + W_2 \frac{(R_1 - R_2)}{c}; \tag{187}$$

* W_1 и W_2 из (224) на стр 56.

для дубль-частиц [6—12]

$$W_1 f_3(t) = W_2 f_4(t), \tag{188}$$

$$W_1 \frac{3}{2\sqrt{2}} T + W_1 \frac{(R_1 - R_2)}{c} = W_2 \frac{3}{2\sqrt{2}} T; \tag{189}$$

для антидубль-частиц

$$W_1 \frac{3}{2\sqrt{2}} T = W_2 \frac{3}{2\sqrt{2}} T + W_2 \frac{R_1 - R_2}{c}. \tag{190}$$

Из этих формул следует:
для частиц

$$\frac{q_2^2}{q_1^2} = \frac{\beta_1^2 (1+\beta_2)^2 (1+t_\nu) n_2^2 \varepsilon_1}{\beta_2^2 (1+\beta_1)^2 n_1^2}, \tag{191}$$

для античастиц

$$\frac{q_2^2}{q_1^2} = \frac{\beta_1^2 (1+\beta_2)^2}{\beta_2^2 (1+\beta_1)^2 (1+t_\nu)}, \tag{192}$$

для дубль-частиц

$$\frac{q_2^2}{q_1^2} = \frac{\beta_1^2 (1+\beta_2)^2 (1+t_{\nu d}) n_2^2}{\beta_2^2 (1+\beta_1)^2 n_1^2 \varepsilon_{1d}}, \tag{193}$$

для антидубль-частиц

$$\frac{q_2^2}{q_1^2} = \frac{\beta_1^2 (1+\beta_2)^2}{\beta_2^2 (1+\beta_1)^2 (1+t_{\nu d})}. \tag{194}$$

Коэффициент $f(R, T)$ в формулах от (184) до (194) учитывает запаздывание, связанное с тем, что излучение либо наружного (у античастиц), либо внутреннего заряда (у частиц) запаздывает на время, равное

$$\Delta t = \frac{R_1^{(2)} - R_2^{(2)}}{c}. \tag{195}$$

Учитывая релятивистское преобразование, имеем для частиц

$$f(R, T) = t_\nu = \frac{(R_1^{(2)} - R_2^{(2)})}{c l' k_\beta}, \tag{196}$$

для дубль-частиц

$$f(R_1 T) = t_{\nu d} = \frac{(R_1^{(2)} - R_2^{(2)})}{cTk_\beta} \frac{8}{9} \varepsilon_{1d}^2. \tag{197}$$

Из этих формул следует, что «коэффициент запаздывания» будет равен для частиц (античастиц)

$$t_\nu = \frac{R_1^{(2)} (1 - R_2^{(2)}/R_1^{(2)})}{cTn_1 (1-\beta_1^2)^{3/2}}, \tag{198}$$

для дубль-частиц (антидубль-частиц)

$$t_{\nu d} = \frac{8}{9} \varepsilon_{1d}^2 \frac{R_1^{(2)} (1 - R_2^{(2)}/R_1^{(2)})}{cTn_1 (1-\beta_1^2)^{3/2}}. \tag{199}$$

Учитывая значения соответствующих величин, имеем

$$t_\nu = \frac{nK_1[(1-\beta_1)-(1-2\pi K/K_1)]}{2\pi n_2 n_1 (1-\beta_1^2)^{3/2}}, \tag{200}$$

$$t_{\nu d} = \frac{8}{9}\varepsilon_{1d}^2 t_\nu. \tag{201}$$

Приведенные формулы и позволяют нам произвести расчет отношения фундаментальных зарядов q_1 и q_2.

Не следует забывать, что все эти величины относятся к значениям этих зарядов, соответствующих тому, как они «отображаются» на первое подпространство. Поэтому, и только поэтому, можно пользоваться в наших расчетах формулами, основанными на условиях неизлучения в первом подпространстве. В собственных системах координат (т. е. во втором и третьем подпространствах) отношение фундаментальных зарядов должно определяться из физических условий в соответствующем подпространстве. При этом, конечно, необходимо выполнять условие самосогласования, которое в данном случае сводится к требованию, чтобы заряды фундаментального поля, наблюдаемые во втором и третьем подпространствах, отражались бы в первом подпространстве, так как этого требуют приведенные формулы.

Чтобы определить не только отношение зарядов q_1 и q_2, но и их абсолютные значения, необходимо учесть условие, следующее из принципа соответствия. При аннигиляции частицы и античастицы или дубль-частицы и антидубль-частицы должно выделяться два кванта с собственной частотой. Энергия, уносимая этими квантами, должна быть равна энергии, которая сконцентрирована в поясе между R_1 и R_2 у каждой из аннигилирующих частиц до того, как они аннигилируют, превратившись в частицу вакуума.

Это условие позволяет связать величину квадрата наружного заряда с константами $\hbar$ и c, которые в работе используются как единицы масштаба, через внутренние параметры частицы.

Для энергии, которую могут излучить, например, наружные фундаментальные заряды, мы можем записать

$$Э = \frac{2q_1^2\beta_1^4 (R_1-R_2)\cos\alpha}{3R_1^2(1-\beta_1^2)^2} \equiv W_1 \frac{(R_1-R_2)}{c}. \tag{202}$$

При аннигиляции энергия, накопившаяся в поясе шириной $(R_1 - R_2)$ за время T при компенсации излучения от наружного и внутреннего зарядов во всем пространстве, должна породить квант с частотой $\nu = 1/T$ и тогда

$$h\nu = \frac{q_1^2\beta_1^4 (R_1-R_2)\cos\alpha}{6R_1^2(1-\beta_1^2)^2} \tag{203}$$

и

$$q_1^2 = \frac{6(1-\beta_1^2)^2 n_1}{\beta_1^3 (1-R_2/R_1)\cos\alpha}\hbar c;$$

отсюда

$$q_1^2 = \frac{3k_x^2}{\pi K(1-\beta_1^2)\beta_1^2\cos\alpha}\hbar c \quad (k_x = n_1(1-\beta_1^2)^{3/2}). \tag{204}$$

Мы получили формулу для определения абсолютного значения наружного заряда (точнее, всех наружных субзарядов) в единицах $\hbar c$, т. е. в безразмерном масштабе.

Аналогично можно получить и формулу для внутренних фундаментальных зарядов, в которой учтен тот факт, что в ТФП квантование происходит на единицу механического момента частицы s, который не обязательно должен быть равным постоянной Планка $\hbar$ (или ее половине). Принцип соответствия требует только, чтобы наблюдаемый в первом подпространстве механический момент частиц — спин — был бы кратным $\hbar$ (или $\hbar/2$). Далее будет показано, что в первом подпространстве мы наблюдаем не собственно спин частицы s, а его проекцию на ось прецессии, которой обладает частица.

Поэтому должно быть

$$q_1^2 = \frac{6sk_x^2}{\pi K (1-\beta_1^2)\beta_1^2}\hbar c. \tag{205}$$

Для античастиц необходимо еще учесть нормализующий их по отношению к «оптимальной»[1] частице множитель, (где 1. *op.* 1.— «первый ряд», «оптимальный мультиплет», «первое состояние»)

$$\left[\frac{(1+t_\nu)\dfrac{\varepsilon_{1(1.op.1)}^{1/2}}{\varepsilon_{2(1.op.1)}^{1/2}}}{(1+t_\nu)_{op}\varepsilon}\right]^{1/2}, \tag{206}$$

а для частиц — множитель

$$A_q = \begin{cases} \dfrac{n_1}{n_2(1+t_\nu)\varepsilon_1^{1/2}}, & NS = 1\ *; \\ (8/9)^{1/4}, & NS = 2; \\ (8/9)^{1/2}\varepsilon_{2d}^{-1/4}\varepsilon_{2(3.op.3)}^{-1}, & NS = 3. \end{cases} \tag{207}$$

Тогда для абсолютного значения q_1 можно записать для частиц

$$q_{1n} = q_1 A_q; \tag{208}$$

для античастиц

$$q_{1n} = q_1\left[\frac{(1+t_\nu)\dfrac{\varepsilon_{1(1.op.1)}^{1/2}}{\varepsilon_{2(1.op.1)}^{1/2}}}{(1+t_\nu)_{op}\varepsilon}\right]^{1/2*}, \qquad \varepsilon = \begin{cases} 1, & NS = 1; \\ \varepsilon_{2(1.op.1)}^{1/2}, & NS \neq 1; \end{cases} \tag{209}$$

для дубль-частиц

$$q_{1dn} = A_q \cdot q_{1d}\frac{\varepsilon_{1(1.op.1)}^{1/2}}{\varepsilon_{2(1.op.1)}^{1/2}}^{*}, \qquad A_q = \begin{cases} \left(\dfrac{9}{8}\right)^{1/4}, & NS = 2; \\ 1, & NS \neq 2; \end{cases} \tag{210}$$

для антидубль-частиц

$$q_{1dn} = q_{1d}\cdot\frac{9}{8}\left[\frac{(1+t_{\nu l})}{2s_{dop}(1+t_{\nu d})_{op}\varepsilon\cdot\varepsilon_{2(1.op.1)}}\right]^{1/2*}, \qquad \varepsilon = \begin{cases} 1, & NS = 2; \\ \varepsilon_{2d}^{1/2}, & NS \neq 2. \end{cases} \tag{211}$$

Понятно, что величина заряда электромагнитного поля q есть разность наружного q_1 и внутреннего q_2 зарядов и легко определяется для всех видов частиц из указанных уравнений.

[1] Оптимальной в ТФП именуется устойчивая частица каждого ряда в рамках их систематизации. Подробнее см. в главе 6 настоящей работы.

* См. стр. 41.

Расчет, выполненный по этим формулам для всех видов частиц, показывает, что амплитудное условие неизлучения выполняется только для электрически заряженных частиц. Следовательно, нейтральные состояния, у которых $q_1 = q_2$, должны иметь очень малое время жизни, так как у них не выполняется условие полного взаимного гашения излучений. Поэтому истинно нейтральных состояний в природе нет. Существуют только системы частиц, взаимно нейтрализующих свой заряд. Они могут состоять из двух и более частиц и иметь разную энергию связи.

Однако далеко не все частицы имеют большое время жизни. В [8] отмечалось, что в каждом ряду только одно состояние удовлетворяет не только условиям неизлучения, но и условиям динамической устойчивости. Но кроме того, взаимодействие ЭЧ с частицами вакуума приводит к тому, что все заряженные ЭЧ, кроме тех, которые образуют устойчивые частицы вакуума, не могут сохранять нужное для выполнения амплитудного условия соотношение зарядов фундаментального поля. Происходит это потому, что вакуум составляют только оптимальные частицы (динамически устойчивые). В то же время разность фундаментальных зарядов (электрический заряд), полученная из амплитудного условия, очень близка у всех заряженных частиц, но не равна строго одной и той же величине. Поскольку между зарядом только что рожденной, не оптимальной частицы и зарядом составных элементов возбужденных частиц вакуума существует различие, происходит концентрация возбужденных частиц вакуума около данной частицы. Это приводит к тому, что заряд самой частицы нормализуется до величины, близкой к доминирующему в вакууме заряду оптимальных частиц. Заряд оптимальных частиц — одинаков.

В формулах (209) — (211) звездочками отмечены нормализующие множители, которые приближают заряд всех частиц к заряду, доминирующему в вакууме, но нарушают полное выполнение амплитудного условия. В 1969 г. при опубликовании [7] это обстоятельство не было еще выяснено, что не позволило тогда найти новый критерий отбора частиц, он был найден в 1970 г. [8].

Таким образом, у частиц есть два заряда: один от момента рождения до нормализации, при котором отсутствует излучение, а второй — нормализованный, обеспечивающий стабильность зарядов, но способствующий появлению излучения, а с ним и переходу частицы в другое состояние. Очевидно, что время нормализации и время перехода частицы в ближайшее устойчивое состояние (время существования) необходимо вычислить. К сожалению, время нормализации пока вычислить не удается, поскольку не все детали этого процесса выяснены. Но можно оценить его порядок. Понятно, что процесс нормализации, являющийся результатом воздействия на одну частицу всего окружающего ее вакуума, должен соответствовать ультрасильному взаимодействию. Очевидно, что такому взаимодействию должно соответствовать время, которое на несколько порядков меньше времени сильного взаимодействия, имеющего порядок 10^{-23} *сек*. Следовательно, с точностью до временных интервалов не более чем 10^{-27} *сек* можно считать время нормализации равным нулю.

Тогда время существования уже нормализованных частиц может быть рассчитано. Оно определится как время, в течение которого нормализованная частица излучит вследствие нарушения амплитудного условия энергию, соответствующую разности между m_N данной частицы и m_{N+1} ближайшего к ней устойчивого состояния.

Поскольку мы пренебрегаем временем нормализации, то точность расчета может не превысить точности до единицы третьего знака, поэтому в формуле для τ_n можно пренебречь величинами, которые отличаются от единицы не более чем на единицу третьего знака для любой частицы. Такими величинами являются β_1, β_2 и ε_1, ε_2, а, конечно, не разность между ними и единицей, например часто используемая в расчетах $(1 - \beta^2)$.

В таком приближении формула для расчета τ_n принимает вид

$$\tau_n \approx \frac{(1 - m_{N+1}/m_N)\, m_N c^2 (1 - \beta_1^2)^{1/2}}{W_\beta \,|\, 1 - q_n^2/q^2 \,|\, (1 - \beta_1^2)_{(1.\ op.\ 1)}}. \tag{212}$$

В отличие от всех ранее приведенных уравнений эта формула размерная, поэтому в нее должно быть подставлено c — численное значение скорости света (в *см/сек*), а также $W\beta$ по формуле (224). Для перехода к безразмерной формуле для τ_n надо разделить выражение в (212) на $\frac{mc^2}{W_\beta}$ для электрона; получим

$$\tau_n = \frac{4s\,(1 - m_{N+1}/m_N)\,(1 - \beta_1^2)^{1/2}}{s_{d(3.\ op.\ 3)} \,|\, 1 - q_n^2/q^2 \,|\, (1 - \beta_1^2)^{1/2}_{(1.\ op.\ 1)}}. \tag{213}$$

Для нейтральных состояний

$$1 - q_n^2/q^2 = 1. \tag{214}$$

Для составных нейтральных состояний справедлива формула (213) для каждого входящего в систему элемента в отдельности, но с учетом того, что одно из них является доминирующим.

Массы соответствующих частиц определяются по формулам, приведенным в следующем параграфе, а массы «соседних» состояний — по тем же формулам для частиц, принадлежащих тому же ряду, но имеющих номер в этом ряду на единицу больше.

Теперь, зная время существования частицы (не время жизни, которое для ряда частиц соответствует переходу в соседнее состояние в данном ряду), мы можем установить критерий отбора частиц по возможности их наблюдения. Отбор по абсолютному значению времени существования нам представляется необъективным, так как возможности эксперимента могут быть улучшены и, кроме того, частица может переходить последовательно в другой ряд возможных состояний, на что потребуется, естественно, больше времени.

Но возможен и такой объективный критерий отбора: понятно, что время существования частицы должно превышать один период ее осцилляции, в противном случае может идти речь о некоем виртуальном процессе перехода частицы через ряд соседних состояний. Оставляя в стороне вопрос о том, правомерно ли предположение о существовании таких виртуальных состояний, мы, во всяком случае, должны утверждать, что частица со временем существования, меньшим одного периода, не может проявлять индивидуальных свойств и рассматриваться как самостоятельный объект. Следовательно, используя значение τ_n, можно записать такой критерий отбора частиц, которые могут наблюдаться:

$$\frac{2\,(1 - m_{N+1}/m_N)\,(1 - \beta_1^2)^{1/2}}{\pi \,|\, 1 - q_n^2/q^2 \,|\, (1 - \beta_1^2)^{1/2}_{(1.\ op.\ 1)}} \geqslant 1. \tag{215}$$

Множитель $(1-\beta^2)^{1/2}_{1.ор.1}$, равно как и множитель в уравнении (212), введен для согласования систем отсчета времени.

Определение массы частиц и спина

Известно [42], что определение полевой массы зарядов в электродинамике требует знаний об объемном распределении зарядов в пространстве и, кроме того, связано с внутренними противоречиями. В ТФП возможны два метода расчета масс ЭЧ. Рассмотрим наиболее простой способ, уже указанный нами в [6]. Этот расчет, выполненный в весьма общем виде, применим для зарядов разной структуры и не требует конкретного представления о распределении этих зарядов.

Изменение энергии и количества движения зарядов во времени при излучении определяются уравнениями [42]

$$W_\beta = \frac{dW}{dt} = -\frac{2q^2\left[\dot{\vec{v}}^2 - \frac{(\vec{v}\times\dot{\vec{v}})^2}{c^2}\right]}{3c^3(1-\beta^2)^3}, \tag{216}$$

$$\frac{d\vec{P}}{dt} = -\frac{\vec{v}}{c^2}W_\beta. \tag{217}$$

При движении по окружности

$$|\dot{\vec{v}}| = \frac{v^2}{R}, \tag{218}$$

и тогда (216) приобретает вид

$$W_0 = \frac{2q^2\beta^4 c}{3R^2(1-\beta^2)^2}. \tag{219}$$

Это без участия реакции излучения.

Определенная часть излучения всегда направлена так, что она своей реакцией тормозит заряд. Тогда эффективное ускорение будет равно

$$|\dot{\vec{v}}| = \frac{v^2}{R} - \left|\frac{d\vec{P}}{dt}\right|\frac{\cos\alpha}{m}, \tag{220}$$

где $\left|\frac{d\vec{P}}{dt}\right|\frac{\cos\alpha}{m}$ — ускорение, вызванное реакцией излучения. С учетом (217) получим, что

$$|\dot{\vec{v}}| = \frac{v^2}{R} - \frac{v}{mc^2}W_\beta\cos\alpha, \tag{221}$$

где $\cos\alpha$ — множитель, показывающий, какая часть излучения направлена против $\dot{\vec{v}}$. Понятно, что для зарядов, располагаемых в плоскости, которая прецессирует, α — есть угол прецессии. Подставляя значение $\dot{\vec{v}}$ из (221) в (216) и учитывая обозначение (219), получим

$$W_\beta = W_0\left(1 - \frac{RW_\beta\cos\alpha}{vmc^2}\right)^2. \tag{222}$$

Для центробежной силы при фиксированном R мы можем записать

$$F = \frac{mc^2\beta^2}{R} = \frac{W_\beta}{c}\cos\alpha, \tag{223}$$

и тогда (222) может быть выражено как

$$W_\beta = W_0(1-\beta)^2. \tag{224}$$

Из (223) и (224) с учетом (219) имеем

$$m = \frac{2q^2\beta^2}{3R(1+\beta)^2c^2}\cos\alpha. \tag{225}$$

До вычисления угла прецессии, найдем механический момент частиц s. Легко видеть, что он определяется из равенства

$$s^{(2)} = m_1^{(2)}\beta_1 R_1^{(2)}c + m_2^{(2)}\beta_2 R_2^{(2)}c. \tag{226}$$

При отображении $s^{(2)}$ на первое подпространство получим

$$s = \sqrt{\frac{9}{8}}\, m_1\beta_1 R_1 c\cos\alpha\left[1 + \frac{m_2\beta_2 R_2}{m_1\beta_1 R_1}\frac{k_x(1-\beta_2^2)^{1/2}}{k_y(1-\beta_1^2)^{1/2}}\right]. \tag{227}$$

С учетом (225) имеем

$$s = \frac{\beta_1^3 q_1^2\cos\alpha}{\sqrt{2}(1+\beta_1)^2 c}\left[1 + \frac{m_2\beta_2 R_2}{m_1\beta_1 R_1}\frac{k_x(1-\beta_2^2)^{1/2}}{k_y(1-\beta_1^2)^{1/2}}\right]. \tag{228}$$

Так как (225) верно как для m_1, так и для m_2, можно записать

$$\frac{m_2\beta_2 R_2}{m_1\beta_1 R_1} = \frac{\beta_2^3(1+\beta_1)^2}{\beta_1^3(1+\beta_2)^2}\frac{q_2^2}{q_1^2}. \tag{229}$$

Подставляя в явном виде значение q_2^2/q_1^2 для частиц, рассмотренных в предыдущем разделе, получим

$$\frac{s}{\hbar} = \frac{\beta_1^3 Q_1^2}{\sqrt{2}(1+\beta_1)^2}\left[1 + \frac{\beta_2 n_2(1-\beta_1^2)(1+t_\nu)\varepsilon_1}{\beta_1 n_1(1-\beta_2^2)}\right]. \tag{230}$$

В таком виде формула для s и указана в [7], где учтено, что для частиц имеет место равенство

$$\frac{q_1^2\cos\alpha}{\hbar c} = Q_1^2. \tag{231}$$

В (230) введено обозначение

$$Q_1^2 = \frac{3k_x^2\cos\alpha}{\pi K\beta_1^2(1-\beta_1^2)}. \tag{232}$$

Можно получить для $s/\hbar \equiv s$ и другое выражение:

$$s = \frac{3}{4}\frac{\beta_1^3 q_1^2\cos\alpha}{(1+\beta_1)^2}\left[1 + \frac{\beta_1^3 n_2^2(1+\beta_2)^2 k_x(1-\beta_2^2)^{1/2}}{\beta_2^3 n_1^2(1+\beta_1)^2 k_y(1-\beta_1^2)^{1/2}}\left(\frac{q_1^2}{q_2^2}\right)_n\right], \text{ где } q_1^2 \equiv q_1^2/\hbar c, \tag{233}$$

в котором учтено, что для нормализованных частиц $\frac{m_1}{m_2} = \frac{\beta_2^2}{\beta_1^2}$. Понятно, что Q_1 и q_2/q_1 необходимо брать для соответствующего вида частиц, входящих в мультиплет с одинаковым K. С учетом этой зависимости, помня, что

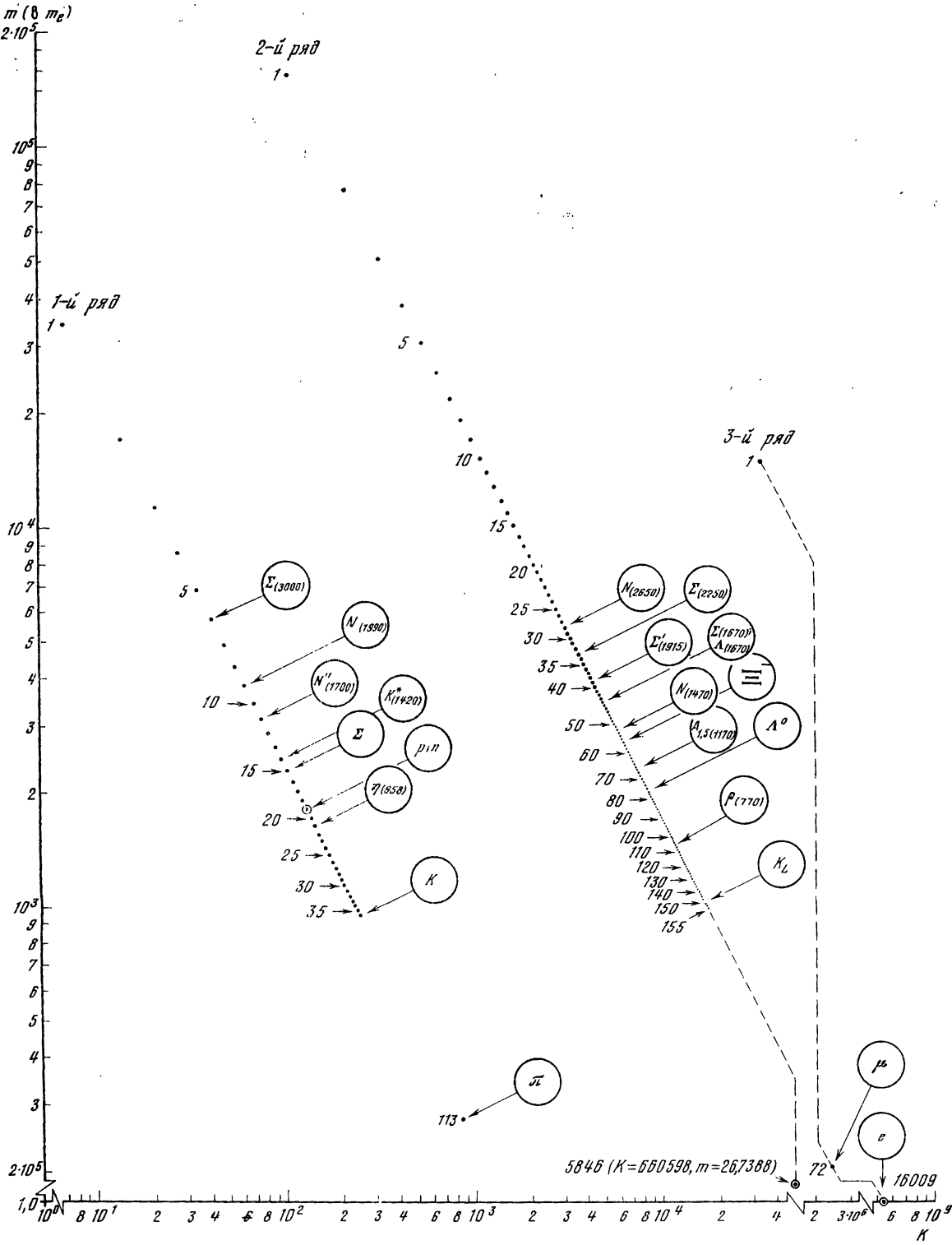


Рис. 4. График зависимости масс частиц от параметра K для первых трех рядов в логарифмическом масштабе

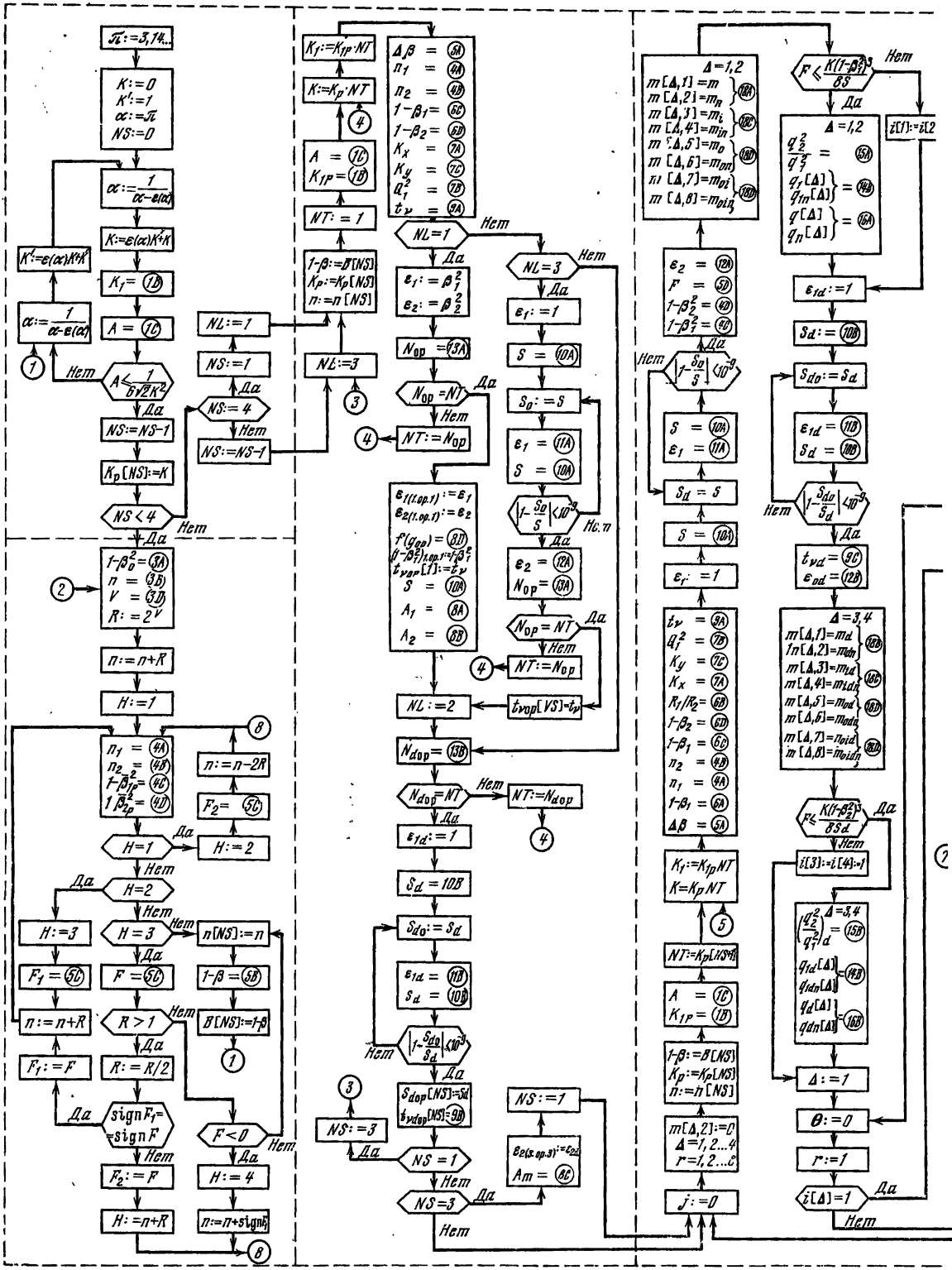


Рис. 5. Блок-схема расчета параметров частиц. Обозначения в кружках — номера формул в табл. 7

$\frac{R_1}{R_2} = \frac{\beta_1 n_1}{\beta_2 n_2}$ (52), можно записать и такую полезную для расчетов зависимость

$$\frac{m_2\beta_2 R_2}{m_1\beta_1 R_1} = \frac{n_2}{n_1}. \qquad (234)$$

Решая совместно формулы для всех величин, входящих в (233) и выраженных через внутренние параметры, получим для $\cos\alpha$ выражение

$$\cos\alpha = s\left\{\frac{3}{4}\frac{\beta_1^3 q_1^2}{(1+\beta_1)^2}\left[1+\frac{\beta_1^3 n_2^2 (1+\beta_2)^2 k_x (1-\beta_2^2)^{1/2}}{\beta_2^3 n_1^2 (1+\beta_1)^2 k_y (1-\beta_1^2)^{1/2}}\left(\frac{q_1^2}{q_2^2}\right)_n\right]\right\}^{-1}. \qquad (235)$$

Численный расчет значения спина J_n для всех ЭЧ приводит к очень важному результату

$$J_n = s\cos\alpha = {}^1/_2 \qquad (N \leqslant N_{op}). \qquad (236)$$

Следовательно, проекция механического момента частиц на ось прецессии, т. е. отображенный на первое пространство спин частиц, для всех нормализованных частиц, масса которых больше массы оптимальных частиц, равен 1/2 ($\hbar/2$). Здесь мы употребляем понятие «оптимальная частица», связанное с методом систематизации частиц. Подробно о систематизации мы будем говорить ниже. Здесь рекомендуем обратиться к рис. 4.

Таким образом, все достаточно устойчивые частицы, которые за время существования в данном состоянии успели нормализоваться, являются фермионами со спином 1/2.

Для частиц, у которых $N > N_{op}$, т. е. масса меньше, чем у оптимальной частицы,

$$J_n = s\cos\alpha = 0 \quad (N > N_{op}). \qquad (237)$$

В этом случае из расчета получается, что $\cos\alpha > 1$, т. е. уходит в мнимую область, и $J_n = 0$. Иначе частицы, масса которых меньше массы оптимальных частиц в данном ряду «прячут» свой механический момент за сферу Шварцшильда и не проявляют его в первом подпространстве. В первом ряду все частицы, номер которых больше 19 (оптимальная частица), имеют спин, равный нулю. К ним относятся, в частности, каон (частица за № 36) и пион (№ 113). Во втором ряду это частицы, наблюдение которых исключено ввиду того, что они обладают очень малым временем существования и не могут успеть нормализоваться вакуумом. В третьем ряду свободное состояние таких частиц также следует исключить. Однако условия, возникающие в атомах и твердых телах, могут позволить возбужденным электронам («квазиэлектронам») малой массы существовать достаточное для нормализации время. В этом случае образование такого рода квазичастиц исключить нельзя.

Частицы, не успевшие с момента рождения нормализоваться вакуумом, будут иметь спин, значение которого будет лежать между s и J_n. Частицы, масса которых меньше массы оптимальных частиц, в любом состоянии будут иметь спин, равный нулю, так как в этом случае $\cos\alpha > 1$. Спин частиц с большой массой в момент рождения до того, как частица хотя бы частично нормализовалась, будет определяться равенством

$$J = \varepsilon\left[A_i s_q \frac{(1-\beta_1^2)^{1/2}}{(1-\beta_1^2)_p^{1/2}} + 0{,}5\right] + 0{,}5, \qquad A_i = \begin{cases} 1, & NS = 1; \\ 2, & NS \neq 1, \end{cases} \qquad (238)$$

где внутренние параметры с индексом p соответствуют оптимальной частице первого ряда, т. е. протону.

Из существующих квантовых теорий наибольшее приближение к теории спина в ТФП нашел Редже, который постулировал правомерность расчета с непрерывно меняющимся (не квантуемым), но мнимым спином. В ТФП аналог спина Редже — величина s, которая не квантуется на величины, кратные 1 или 1/2, и является для первого подпространства мнимой. Правда, в ТФП мнимый спин меняется не непрерывно, а дискретно, хотя и не кратно указанным числам.

Определение магнитного момента частиц

В ТФП внутренние (проявляющиеся за сферой Шварцшильда) свойства частиц отображаются на первое подпространство так, как если бы заряды фундаментального поля двигались по концентрическим окружностям радиуса R_1 и R_2, т. е. радиусам, которые определяются из условий неизлучения, рассмотренных в главе 3. Следовательно, мы можем определить магнитный момент по формулам для определения магнитного момента кругового тока

$$\mu = \frac{|q_1|}{\varepsilon_1}\frac{\nu_{01}\pi R_1^2}{c} - \frac{|q_2|}{\varepsilon_2}\frac{\nu_{02}\pi R_2^2}{c}. \tag{239}$$

но $\nu_{0\beta} = \dfrac{\beta c}{2\pi R_\beta}$, и тогда

$$\mu = \frac{|q_1|}{\varepsilon_1}\frac{\beta_1 R_1}{2} - \frac{|q_2|}{\varepsilon_2}\frac{\beta_2 R_2}{2}. \tag{240}$$

или

$$\mu = \frac{|q_1|\beta_1 R_1}{2\varepsilon_1}\left[1 - \left|\frac{q_2}{q_1}\right|\frac{\beta_2 R_2 \varepsilon_1}{\beta_1 R_1 \varepsilon_2}\right]. \tag{241}$$

Если выразить μ в собственных магнетонах, то получим

$$\mu_{\text{заряж}} = \frac{e\hbar}{2mc} = \frac{\hbar\,||q_1| - |q_2||}{2mc},$$
$$\mu = \frac{|q_1|\beta_1 R_1 mc}{\hbar\varepsilon_1\,||q_1| - |q_2||}\left[1 - \left|\frac{q_2}{q_1}\right|\frac{\beta_2 R_2 \varepsilon_1}{\beta_1 R_1 \varepsilon_2}\right]. \tag{242}$$

Иначе

$$\mu = \frac{q_{1,2}}{|q_{1,2}|}\frac{\beta_1 R_1 mc}{\varepsilon_1 \hbar}\left[\frac{\varepsilon_1\beta_2 R_2}{\varepsilon_2\beta_1 R_1} + \frac{1 - \dfrac{\varepsilon_1\beta_2 R_2}{\varepsilon_2\beta_1 R_1}}{1 - \left|\dfrac{q_2}{q_1}\right|}\right]. \tag{243}$$

Поскольку $m = \dfrac{2s\hbar\beta_L}{R_1 c\varepsilon}$, где $\varepsilon = \begin{cases}\varepsilon_{2(1.\,op.\,1)}, & \Delta^* = 1, 2;\\ \varepsilon_{1(1.\,op.\,1)}, & \Delta = 3, 4,\end{cases}$

мы можем для μ (античастиц) получить окончательно (для $I \neq 0$).

$$\mu = \frac{q_{1,2}\beta_1\beta_L}{|q_{1,2}|\varepsilon_1\varepsilon_{2(1.\,op\,1)}}\left[\frac{\varepsilon_1\beta_2 R_2}{\varepsilon_2\beta_1 R_1} + \frac{1 - \dfrac{\varepsilon_1\beta_2 R_2}{\varepsilon_1\beta_1 R_1}}{1 - \left|\dfrac{q_2}{q_1}\right|}\right]. \tag{244}$$

* Знак Δ обозначает номер состояния в мультиплете.

Для частиц, у которых при формировании токов, ответственных за магнитный момент, отсутствует влияние ε_1 и ε_2 (у дубль-частиц) будем иметь соответственно

$$\mu_d = \frac{|q_1|\nu_{01}\pi R_1^2}{c} - \frac{|q_2|\nu_{02}\pi R_2^2}{c} \tag{245}$$

и

$$\mu_d = \frac{|q_1|\beta_1 R_1}{2}\left[1 - \left|\frac{q_2}{q_1}\right|\frac{\beta_2 R_2}{\beta_1 R_1}\right]. \tag{246}$$

В собственных магнетонах

$$\mu_d = \frac{q_{1,2}}{|q_{1,2}|}\frac{\beta_1 R_1 mc}{\hbar}\left[\frac{\beta_2 R_2}{\beta_1 R_1} + \frac{1 - \dfrac{\beta_2 R_2}{\beta_1 R_1}}{1 - \left|\dfrac{q_2}{q_1}\right|}\right]. \tag{247}$$

Или, выражая массу, окончательно имеем (при $I \neq 0$)

$$\mu_d = \frac{q_{1,2}}{|q_{1,2}|}\frac{\beta_1\beta_L}{\varepsilon_{1(1.\,op.\,1)}}\left[\frac{\beta_2 R_2}{\beta_1 R_1} + \frac{1 - \dfrac{\beta_2 R_2}{\beta_1 R_1}}{1 - \left|\dfrac{q_2}{q_1}\right|}\right]. \tag{248}$$

Для нейтрального состояния $|q_1| = |q_2|$, у которого также отсутствует влияние ε_1 и ε_2, получим из (245)

$$\mu_0 = \frac{|q_1|\beta_1 R_1}{2}\left[1 - \frac{\beta_2 R_2}{\beta_1 R_1}\right]. \tag{249}$$

Считая, что у нейтрального состояния данной частицы в определении магнетона Бора должен участвовать заряд, соответствующий заряженному состоянию в этом же мультиплете (при том же значении K), т. е. что $|q_{1\text{нейтр}}| = |q_{2\text{нейтр}}|$ и $|q_{1\text{заряж}}| = |q_{1\text{нейтр}}|$, получим для магнитного момента нейтрального состояния формулу (при $J \neq 0$).

$$\mu_0 = \frac{q_1 3_1\beta_L\varepsilon}{|q_1|\varepsilon_1^{1/2}}\left[\frac{1 - \dfrac{\beta_2 R_2}{\beta_1 R_1}}{\left|1 - \left(\dfrac{q_2}{q_1}\right)_q\right|}\right]. \tag{250}$$

При выводе (250) учтено, что масса нейтрального состояния, входящая в определение величины собственного магнетона, не равна массе заряженного состояния и между ними имеет место зависимость

$$m_0 = m_{\text{заряж}}\frac{\varepsilon_1^{1/2}}{\varepsilon}. \tag{251}$$

В предыдущих расчетах мы использовали ε_1 и ε_2. Эти величины при полевом рассмотрении частиц могут трактоваться как соответствующие проницаемости. При «частичном» рассмотрении они характеризуют кривизну пространства и однозначно определяются g_{00}, являющейся нулевой составляющей метрического тензора g_{ik}. Найдем способ вычисления ε_1 и ε_2, рассматриваемых как диэлектрические проницаемости.

Метрические и диэлектрические свойства вакуума

Элементарные частицы вакуума первого подпространства в теории представляют собой систему из двух частиц, принадлежащих одному мультиплету ПЗМ и отличающихся только знаками фундаментальных зарядов, т. е. систему из частицы и античастицы. В результате соединения таких частиц в границах одной сферы Шварцшильда в первом подпространстве исчезает всякая информация об этой «аннигилировавшей» паре. Это и есть невозбужденная ЭЧВ. В собственной системе координат ЭЧ или ЭЧВ во втором и третьем подпространствах структура ЭЧВ даже при отсутствии возбуждения «видна». Поэтому ЭЧ могут возбудить ЭЧВ. Рассмотрим, что в результате этого произойдет. Пусть на пару античастиц подействовало некоторое поле E, меняющееся с частотой ω, тогда для дипольного плеча x, образовавшегося между частицей и античастицей (до возбуждения они находились в одной плоскости), имеем

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = 2qE_0e^{-i\omega t}, \tag{252}$$

откуда

$$x = -\frac{2q}{m\omega^2}E_0e^{-i\omega t}, \tag{253}$$

дипольный момент

$$xq = p = -\frac{2q^2}{m\omega^2}E_0e^{-i\omega t}, \tag{254}$$

поляризация

$$\vec{p} = -\frac{2q^2n_W}{m\omega^2}\vec{E}_0e^{-i\omega t}. \tag{255}$$

Следовательно, диэлектрическая проницаемость

$$\varepsilon = 1 - \frac{8\pi q^2n_W}{m(\omega_W^2 - \omega^2)}. \tag{256}$$

Для частиц в ТФП

$$q = q_1 - q_2 = \sqrt{\alpha\hbar c}, \quad m = \frac{2s\hbar\beta_L}{R_1c\varepsilon_W}, \tag{257}$$

$$\omega_1 = \frac{\beta_1c}{R_1}, \qquad \omega_2 = \frac{\beta_2c}{R_2}. \tag{258}$$

Тогда для ε_1 получим

$$(1 - \varepsilon_1) = \frac{8\pi\alpha\hbar cn_W\beta_2k_y\varepsilon_1\beta_L2s_p}{m\omega_1^2\beta_1k_x\varepsilon_W}, \tag{259}$$

где $n_W = \dfrac{1}{8\pi^2R_1^3}$ — концентрация ЭЧВ. (260)

Для ε_2 имеем

$$1 - \varepsilon_2 = \frac{8\pi\alpha\hbar cn_W\beta_2k_y\varepsilon_2(1 - \beta_2^2)2s_p}{m\omega_2^2\beta_1k_x\varepsilon_W(1 - \beta_1^2)}. \tag{261}$$

Или

$$\varepsilon_1 = \left(1 + \frac{8\pi\alpha\hbar c n_W \beta_2 k_y \beta_L 2 s_p}{m\omega_1^2 \beta_1 k_x \varepsilon_W}\right)^{-1}, \tag{262}$$

$$\varepsilon_2 = \left(1 + \frac{8\pi\alpha\hbar c n_W \beta_2 k_y (1-\beta_2^2) 2 s_p}{m\omega_2^2 \beta_1 k_x \varepsilon_W (1-\beta_1^2)}\right)^{-1}. \tag{263}$$

Для оптимальной частицы первого ряда (протона)

$$\varepsilon_1 = \beta_1^2, \quad \varepsilon_2 = \beta_2^2. \tag{264}$$

Выражая ε_1 и ε_2 через ε_{1p} и ε_{2p}, для протона имеем

$$\varepsilon_1 = \left(1 + \frac{A_1}{s}\frac{k_y\beta_2}{k_x\beta_1^3}\right)^{-1}, \tag{265}$$

$$\varepsilon_2 = \left(1 + \frac{A_2}{s}\frac{k_y\beta_2}{k_x\beta_1^3}\right)^{-1}, \tag{266}$$

где

$$A_1 = \text{const} = s(1-\beta_1^2)\left.\frac{k_x\beta_1}{k_y\beta_2}\right|_{1.\,op.\,1}, \tag{267}$$

$$A_2 = \text{const} = s(1-\beta_2^2)\left.\frac{k_x\beta_1^3}{k_y\beta_2^3}\right|_{1.\,op.\,1}. \tag{268}$$

Постоянные A_1 и A_2 можно выразить еще и так:

$$A_1 = \frac{\alpha}{\pi} s_p, \quad A_2 = \frac{\alpha}{\pi} s_p \left[\frac{(1-\beta_2^2)\beta_1^2}{(1-\beta_1^2)\beta_2^2}\right]_p. \tag{269}$$

Таким образом, для всех частиц, нормализованных в вакууме,

$$(\varepsilon_1^{-1} - 1) s \frac{\beta_1^3 k_x}{\beta_2 k_y} = \frac{\alpha}{\pi} s_p, \tag{270}$$

$$(\varepsilon_2^{-1} - 1) s \frac{\beta_1^3 k_x}{\beta_2 k_y} = \frac{\alpha}{\pi} s_p \left[\frac{(1-\beta_2^2)\beta_1^2}{(1-\beta_1^2)\beta_2^2}\right]_p. \tag{271}$$

Следовательно,

$$\frac{\varepsilon_1^{-1} - 1}{\varepsilon_2^{-1} - 1} = \left|\frac{(1-\beta_1^2)\beta_2^2}{(1-\beta_2^2)\beta_1^2}\right|_p = \text{const}. \tag{272}$$

В ТФП существуют два дополнительных (в смысле Бора) способа описания ЭЧ и ЭЧВ. В первом случае «частица» рассматривается как центр симметрии распределенного во всем пространстве поля, и тогда в этой точке $r = 0$, $E = 0$. Действительно, из потенциала $\varphi = \frac{q}{r} e^{-R/r}$ имеем

$$\vec{E} = -\operatorname{grad}\varphi = q\frac{e^{-R/r}}{r^2}\left(1 - \frac{R}{r}\right)\frac{\vec{r}}{r} \tag{273}$$

и

$$\rho = \frac{\operatorname{div}\vec{E}}{4\pi} = \frac{q}{4\pi r^3}\frac{R}{r}e^{-R/r}\left(2 - \frac{R}{r}\right). \tag{274}$$

Следовательно, при $r = 0$, т. е. в центре «частицы», $E = 0$ и $\rho = 0$ (см. рис. 3). При полевом рассмотрении плотность заряда распределена во всем пространстве, в центре — «частице», так сказать, ничего нет. Сам же заряд q, который входит в потенциал φ, надо рассматривать как постоянную для данной структуры интегральную величину

$$Q = \int_0^\infty \rho dv = qe^{-R/r}\left(1 - \frac{R}{r}\right)\Big|_0^\infty = q. \tag{275}$$

Это полевое описание частицы. При таком описании понятия о локальном заряде и локальной массе просто бессмысленны — их нет. Но мы знаем, что у частицы есть заряд и масса. И в этом физическая сущность двуединства микромира и принципа дополнительности. Фундаментальное поле, распределенное в первом подпространстве, сферически симметрично (для покоящейся в этом подпространстве частицы) и проявляет массу как меру инерции только в центре симметрии — в точке, где плотность заряда равна нулю. Это дает нам право именовать эту точку частицей и приписывать ей массу.

Отметим, что вакуум обладает не только рассмотренной диэлектрической, но и магнитной проницаемостью

$$\mu = 1 + 4\pi\chi = \left(1 + \frac{2\pi n_W q^2 l_W^2}{3mc^2}\right)^{-1}. \tag{276}$$

С другой стороны, траектория локальной частицы, обладающей массой, деформируется в соответствии с метрическими свойствами пространства. Понятно, что это две стороны одной медали, отмеченные еще при формировании основ квантовой теории.

В главе 3, решая основные уравнения ТФП, мы ограничились

$$R_{ik}(m) = 0, \tag{277}$$

рассмотрим теперь решения вида

$$R_{ik}(m, M) = 0 \tag{278}$$

и

$$R_{ik}(m, q) = 0 \tag{279}$$

Аналогичные задачи рассматривались в ОТО. Для (278) наиболее перспективным считается решение Керра [16]

$$ds^2 = \left(1 - \frac{r_\gamma r}{A_k^2}\right)c^2dt^2 - \frac{A_k^2}{A_r}dr^2 - A_k^2 d\theta^2 - \left(r^2 + a^2 + \frac{r_\gamma r a^2}{A_k^2}\sin^2\theta\right)\sin^2\theta d\varphi^2 + \\ + \frac{2r_\gamma r a}{A_k^2}\sin^2\theta d\varphi\, cdt, \tag{280}$$

где

$$A_k^2 = r^2 + a^2\cos^2\theta; \quad A_r = r^2 - r_\gamma r + a^2 \tag{281}$$

и

$$a = \frac{M}{mc}, \tag{282}$$

а для (279) — Рейснера—Нордстрема

$$ds^2 = \left(1 + \frac{q^2\gamma}{r^2c^4} - \frac{\gamma m}{rc^2}\right)c^2\,dt^2 - 2c\,dt\,dr - r^2\,(d\theta + \sin^2\theta\,d\varphi). \tag{283}$$

Очень интересно, что (280) и (283) имеют по два горизонта событий над сферой Шварцшильда $r_\gamma = \frac{2m\gamma}{c^2}$ и под ней. Радиусы этих горизонтов событий, определенные из (280), имеют вид

$$r_{M(+)} = \frac{r_\gamma}{2} + \left[\left(\frac{r_\gamma}{2}\right)^2 - a^2\cos^2\theta\right]^{1/2} \tag{284}$$

и

$$r_{M(+)} = \frac{r_\gamma}{2} + \left[\left(\frac{r_\gamma}{2}\right)^2 - a^2\right]^{1/2}. \tag{285}$$

Это над горизонтом событий, а под ним

$$r_{M(-)} = \frac{r_\gamma}{2} - [(r_\gamma/2)^2 - a^2\cos^2\theta]^{1/2}, \quad r_{M(-)} = \frac{r_\gamma}{2} - [(r_\gamma/2)^2 - a^2]^{1/2}. \tag{286}$$

Из (283) соответственно имеем

$$r_{q(+)} = \frac{r_\gamma}{2} + \left[\left(\frac{r_\gamma}{2}\right)^2 - \frac{q^2\gamma}{c^4}\cos^2\theta\right]^{1/2}, \tag{287}$$

$$r_{q(+)} = \frac{r_\gamma}{2} + \left[\left(\frac{r_\gamma}{2}\right)^2 - \frac{q^2\gamma}{c^4}\right]^{1/2}, \tag{288}$$

$$r_{q(-)} = \frac{r_\gamma}{2} - \left[\left(\frac{r_\gamma}{2}\right)^2 - \frac{q^2\gamma}{c^4}\cos^2\theta\right]^{1/2}, \tag{289}$$

$$r_{q(-)} = \frac{r_\gamma}{2} - \left[\left(\frac{r_\gamma}{2}\right)^2 - \frac{q^2\gamma}{c^4}\right]^{1/2}. \tag{290}$$

В ТФП должны использоваться как решения Фока—Шварцшильда, так и решения Керра и Рейснера—Нордстрема [16] соответственно условиям рассмотрения ЭЧ (вид подпространства и «зарядовый» или «массовый» вариант частичного рассмотрения). Поскольку в ТФП все три вида решений относятся к одному объекту, они должны удовлетворять условиям самосогласования. Эти условия, записанные в виде

$$r_M \equiv r_q \tag{291}$$

и

$$g_{00}(m, q) \equiv g_{00}(m), \tag{292}$$

приводят к зависимостям

$$q^2\gamma/c^4 = a^2 \tag{293}$$

и

$$\left(1 + \frac{q^2\gamma}{r^2c^4} - \frac{\gamma m}{rc^2}\right) = \left(1 - \frac{2\gamma m}{rc^2}\right), \tag{294}$$

из которых на параметры ЭЧ накладываются условия

$$m = -\frac{q^2}{rc^2}, \tag{295}$$

$$\gamma = \frac{q^2}{m^2}. \tag{296}$$

Зависимости (295) и (296) в ТФП справедливы только для нормализованных частиц при отсутствии дисперсии во втором подпространстве.

Некоторые результаты решений основных уравнений ТФП для элементарных частиц приведены в табл. 3.

Таблица 3

Значения некоторых параметров в разных подпространствах

Подпространство	g_{00}			β			R		
	m_1	m_2	m	m_1	m_2	m	m_1	m_2	m
$P_1 \cup M_1$	—	—	1	—	—	0	—	—	—
$P_2 \cup M_2$	$\frac{1-\beta_1^2}{1+\beta_1^2}$	$\frac{1-\beta_2^2}{1+\beta_2^2}$	$\frac{\beta_1^2-\beta_2^2}{2}$	β_1	β_2	β_L	$R_1\frac{2n}{n_1}$	$R_2\frac{2n}{n_2}$	$2R_L$
$P_3 \cup M_3$	$\frac{1-\beta_1^2}{\beta_1^2}$	$\frac{1-\beta_2^2}{\beta_2^2}$	$\frac{\beta_1^2-\beta_2^2}{1}$	$n_1\beta_1$	$n_2\beta_2$	—	R_1	R_2	R_L
$P_2 \cup M_2$ на $P_1 \cup M_1$	$1-\beta_1^2$	$1-\beta_2^2$	$\beta_1^2-\beta_2^2$	β_1	β_2	β_L	R_1	R_2	R_L
$P_3 \cup M_3$ на $P_1 \cup M_1$	$\frac{1-\beta_1^2}{1+\beta_1^2}$	$\frac{1-\beta_2^2}{1+\beta_2^2}$	$\frac{\beta_1^2-\beta_2^2}{2}$	β_1	β_2	β_L	$R_1\frac{2n}{n_1}$	$R_2\frac{2n}{n_2}$	$2R_L$

Из (284) и (285), кроме того, следует, что если $M = mR\beta c$, то

$$R = \frac{r_\gamma}{2^{1/2}(1+\beta^2)^{1/2}} > \frac{r_\gamma}{2},$$

а из (286) — что $\beta = 1$ и R и e зависят в этом случае от r_γ.

Поскольку в модели ЭЧ в ТФП β близка к единице, то решения (284) и (285), так же как (287) и (288), дают довольно четкое представление о структуре частиц. Решение без $\cos\theta$ соответствует центрально-симметричной модели без прецессии, а с $\cos\theta$ — характеризует область нахождения субчастиц с учетом прецессии (ср. [53—55]).

Устойчивость структуры элементарных частиц

Устойчивость структуры ЭЧ также надо рассматривать и в частичном, и в полевом аспекте. В первом случае она характеризуется весьма простыми зависимостями. Механическая устойчивость масс-дипольной системы, состоящей из положительной и отрицательной масс и совершающей движение около их общего центра тяжести, который вследствие наличия отрицательной массы оказывается снаружи диполя, определяется как требованием сохранения момента, так и равенством направленных в разные стороны (из-за разных знаков масс) центробежных сил.

Закон сохранения момента требует, чтобы во всех подпространствах выполнялось условие

$$m_1^{(i)}R_1^{(i)} + m_2^{(i)}R_2^{(i)} = 0, \quad i = 1, 2, 3. \tag{297}$$

Из него следует, что во втором подпространстве

$$m_1^{(2)}R_1^{(2)} = m_2^{(2)}R_2^{(2)}, \tag{298}$$

$$\frac{m_1^{(2)}}{m_2^{(2)}} = \frac{R_2^{(2)}}{R_1^{(2)}} = \frac{\beta_2}{\beta_1}; \tag{299}$$

в третьем подпространстве

$$m_1^{(3)}R_1^{(3)} = m_2^{(3)}R_2^{(3)}, \tag{300}$$

$$\frac{m_1^{(3)}}{m_2^{(3)}} = \frac{R_2^{(3)}}{R_1^{(3)}} = \frac{R_2}{R_1} = \frac{\beta_2 n_2}{\beta_1 n_1}. \tag{301}$$

Для параметров, характеризующих отображение внутренних свойств на первое подпространство (условно)

$$m_1^{(2\to1)}R_1^{(2\to1)} + m_2^{(2\to1)}R_2^{(2\to1)} = 0, \tag{302}$$

$$\frac{m_1^{(2\to1)}}{m_2^{(2\to1)}} = \frac{R_2^{(2\to1)}}{R_1^{(2\to1)}} \equiv \frac{R_2}{R_1} = \frac{\beta_2 n_2}{\beta_1 n_1}. \tag{303}$$

Условия чисто механической устойчивости должны быть записаны так:

$$\frac{m_1^{(i)}(v_1^{(i)})^2}{R_1^{(i)}} = \frac{m_2^{(i)}(v_2^{(i)})^2}{R_2^{(i)}}. \tag{304}$$

Отсюда для второго подпространства

$$\frac{m_1^{(2)}}{m_2^{(2)}} = \frac{R_1^{(2)}(v_2^{(2)})^2}{R_2^{(2)}(v_1^{(2)})^2}, \tag{305}$$

$$\frac{R_1^{(2)}}{R_2^{(2)}} = \frac{v_1^{(2)}}{v_2^{(2)}}, \quad \omega_{1,2}^{(2)} = \frac{v_1^{(2)}}{R_1^{(2)}} = \frac{v_2^{(2)}}{R_2^{(2)}}; \tag{306}$$

для третьего

$$\frac{m_1^{(3)}}{m_2^{(3)}} = \frac{R_1^{(3)}(v_2^{(3)})^2}{R_2^{(3)}(v_1^{(3)})^2}, \tag{307}$$

$$\frac{R_1^{(3)}}{R_2^{(3)}} = \frac{v_1^{(3)}}{v_2^{(3)}}, \quad \omega_{1,2}^{(3)} = \frac{v_1^{(3)}}{R_1^{(3)}} = \frac{v_2^{(3)}}{R_2^{(3)}}; \tag{308}$$

для отображения на первое (условно)

$$\frac{m_1^{(3\to1)}}{m_2^{(3\to1)}} = \frac{R_1^{(3\to1)}(v_2^{(3\to1)})^2}{R_2^{(3\to1)}(v_1^{(3\to1)})^2}, \tag{309}$$

$$\frac{R_1^{(3\to1)}}{R_2^{(3\to1)}} = \frac{v_1^{(3\to1)}}{v_2^{(3\to1)}}, \quad \frac{v_1^{(3\to1)}}{v_2^{(3\to1)}} = \frac{\beta_1 n_1}{\beta_2 n_2} \equiv \frac{R_1}{R_2}. \tag{310}$$

С учетом описанного «тахионного эффекта» можно записать

$$\beta_1^{(3)} = n_1\beta_1; \qquad \beta_2^{(3)} = n_2\beta_2. \tag{311}$$

Приведенные уравнения показывают, какими должны быть соотношения между основными механическими характеристиками ЭЧ.

Устойчивость ЭЧ при «зарядовом» их рассмотрении определяется тем, что «электростатическое» притяжение зарядов разных знаков должно компенсироваться давлением стоячей волны, которая возникает между R_1 и R_2 вследствие того, что снаружи излучения нет. Это требование означает, что должно соблюдаться условие

$$\begin{aligned} &\frac{q_1^{(2)}}{n_1\varepsilon_1}\,\frac{q_2^{(2)}}{n_2\varepsilon_2\,(R_1-R_2)^2}\,\frac{k_y}{(1-\beta_2^2)^{1/2}} = \frac{4}{9}\,\frac{(q_2^{(2)})^2\beta_2^4}{n_1R_2^2\,(1+\beta_2)^2}, && \Delta = 1,2;\\ &\frac{q_1^{(2)}}{n_1}\,\frac{q_2^{(2)}}{n_2\,(R_1-R_2)^2}\,\frac{k_y}{(1-\beta_2^2)^{1/2}} = \frac{4}{9}\,\frac{(q_1^{(2)})^2\beta_1^4}{n_1R_1^2\,(1+\beta_1)^2\varepsilon_2\varepsilon_1}, && \Delta = 3,4. \end{aligned} \tag{312}$$

Подставляя соответствующие значения, получим

$$\begin{aligned} &2\pi K = \frac{3n_2\,(1-\beta_2^2)^{1/2}(1+\beta_2)}{2\beta_2\varepsilon_1^{1/2}\varepsilon_2^{1/2}}, && \Delta = 1,2;\\ &2\pi K = \frac{3n_2\,(1-\beta_2^2)^{1/2}\,(1+\beta_1)}{2\beta_2\varepsilon_{1\,(1.\,op.\,1)}^{-1/2}\varepsilon_{2\,(1.\,op.\,1)}^{-1/2}}, && \Delta = 3,4. \end{aligned} \tag{313}$$

Это условие может быть записано и для порядкового номера частицы в каждом из рядов возможных состояний частиц

$$\begin{aligned} &N_{0p} = \frac{A_0 n}{1+\dfrac{A_0K_{1p}}{2}}, \quad \text{где} \quad A_0 = \frac{3\,(1-\beta_2^2)^{1/2}\,(1+\beta_2)}{4\beta_2\varepsilon_1^{1/2}\varepsilon_2^{1/2}\pi K_p}, && \Delta = 1,2;\\ &N_{0p} = \frac{A_{0d}n}{1+\dfrac{A_{0d}K_{1p}}{2}}, \quad \text{где} \quad A_{0d} = \frac{3\,(1-\beta_2^2)^{1/2}\,(1+\beta_1)}{4\beta_2\varepsilon_{1(1.op.1)}^{-1/2}\,\varepsilon_{2(1.op.1)}^{-1/2}\pi K_p}, && \Delta = 3,4. \end{aligned} \tag{314}$$

Если все параметры частицы определены абсолютно точно, то величина, найденная из (314), должна быть целым числом.

Результаты расчета, о которых далее будет говориться подробнее, показывают, что этому условию из всех мыслимых состояний элементарных частиц удовлетворяют только заряженные ЭЧ, имеющие № 19 в первом ряду возможных состояний и № 16009 — в третьем ряду возможных состояний.

Соотношение всех параметров этих оптимальных частиц показывает, что в первом ряду—это протон (антипротон), а в третьем—электрон (позитрон). Только для этих состояний удовлетворяется (314), причем с точностью, которую позволяет расчет, найденные величины являются целыми числами.

Глава 5

ВНУТРЕННЯЯ САМОСОГЛАСОВАННОСТЬ ТЕОРИИ

Соотношение между массой и энергией

Определим энергию поля, созданного потенциалом

$$\varphi_{1,2} = \frac{q_1 e^{-\frac{R_1}{r}}}{r} - \frac{q_2 e^{-\frac{R_2}{r}}}{r}. \tag{315}$$

Тогда

$$E_{1,2} = \frac{1}{r^2}\left[q_1\left(1 - \frac{R_1}{r}\right)e^{-\frac{R_1}{r}} - q_2\left(1 - \frac{R_2}{r}\right)e^{-\frac{R_2}{r}}\right] \tag{316}$$

и

$$U_E = \frac{1}{8\pi}\int_0^\infty E_{1,2}^2 dv = \frac{q_1^2}{8R_1}\left[1 + \frac{q_2^2}{q_1^2}\frac{R_1}{R_2} - \frac{R_2}{R_1}\frac{16q_2}{q_1\left(1+\frac{R_2}{R_1}\right)^3}\right]. \tag{317}$$

Соответственно для магнитной составляющей получим

$$U_H = \frac{1}{8\pi}\int_0^\infty H_{1,2}^2 dv = \frac{\beta_1^2 q_1^2}{4R_1}\left[1 + \frac{\beta_2^2 q_2^2 R_1}{\beta_1^2 q_1^2 R_2} - \frac{4\beta_2 q_2}{\beta_1 q_1\left(1+\frac{R_2}{R_1}\right)}\right]. \tag{318}$$

Если $R_1 \approx R_2$ и $\beta_1 \approx \beta_2$, то

$$U_E \approx \frac{(q_1 - q_2)^2}{8R_1}, \tag{319}$$

$$U_H \approx \frac{(q_1 - q_2)^2}{4R_1}. \tag{320}$$

Эти предельные случаи хорошо согласуются со значениями энергии для наружного

$$\frac{q_1^2}{2}\int_0^\infty \left(1 - \frac{R_1}{r}\right)^2 \frac{e^{-2\frac{R_1}{r}}}{r^2} dr = \frac{q_1^2}{8R_1} \tag{321}$$

и внутреннего

$$\frac{q_2^2}{2}\int_0^\infty \left(1 - \frac{R_2}{r}\right)^2 \frac{e^{-2\frac{R_2}{r}}}{r^2} dr = \frac{q_2^2}{8R_2} \tag{322}$$

зарядов фундаментального поля.

В ТФП энергия, определяемая из (317) и (319), соответствует наблюдаемому электромагнитному полю, но она не может соответствовать наблюдаемой массе, ибо за ее образование ответственны заряды фундаментального поля, непосредственно не проявляющие себя в первом подпространстве.

Наблюдаемую в первом подпространстве массу должна характеризовать энергия

$$U_m = \frac{q_1^2}{8R_1} + \frac{q_2^2}{8R_2} + \frac{\beta_1^2 q_1^2}{4R_1} + \frac{\beta_2^2 q_2^2}{4R_2}, \tag{323}$$

т. е. должно выполняться условие

$$\tilde{m} = \frac{U_m}{c^2}. \tag{324}$$

Конечно, все параметры в этих уравнениях должны соответствовать значениям, характеризующим отображение свойств, наблюдаемых во втором подпространстве, на первое. Поэтому для получения возможности сопоставления этой формулы для массы с формулой

$$m = \frac{2s\hbar\beta_L}{R_1\varepsilon}, \qquad \varepsilon = \begin{cases} \varepsilon_{2(1.op.1)}, & \Delta = 1, 2; \\ \varepsilon_{1(1.op.1)}, & \Delta = 3, 4, \end{cases} \tag{325}$$

выведенной на основе (225), мы должны записать (324) в виде

$$\tilde{m} = \frac{U_m}{c^2} B_s, \tag{326}$$

где

$$B_s = \frac{3}{\sqrt{2}} s \frac{k_x (1 - \beta_2^2)^{1/2} \varepsilon_1}{k_y (1 - \beta_1^2)^{1/2} \varepsilon_2^{1/2}}, \qquad \Delta = 1.$$

Условие самосогласованности требует, чтобы оба выражения для масс были равны между собой.

Легко видеть, что сопоставляемые уравнения не сводятся одно к другому, и поэтому требование их взаимного самосогласования не носит тривиальный характер.

В табл. 4 указаны значения отношения $\tilde{m}/m$ для целого ряда ЭЧ. Как видно, оба метода расчета масс ЭЧ находятся в отличном самосогласовании, глубина которого характеризуется еще и тем, что значения $\bar{q}_1$ и $\bar{q}_2/\bar{q}_1$, найден-

Таблица 4

Отношения $\tilde{m}/m$ для разных состояний (включая виртуальные) первых трех рядов

Номер ряда	Номер частицы в ряду	Частицы		Дубль-частицы	
		ч $\Delta = 1$	а $\Delta = 2$	ч $\Delta = 3$	а $\Delta = 4$
1	1	0,999570	0,999065	0,999480	0,999743
	19	0,999990	0,999995	0,994897	1,00809
	36	0,997248	1,01134	0,988562	1,02586
	113	0,914944	1,10215	0,899526	1,14973
2	1	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000
	47	1,00000	1,00003	0,999968	1,00012
	5 846	1,00001	1,00336	0,996190	1,01313
3	1	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000
	72	1,00000	1,00001	0,999982	1,00006
	16 009	0,999961	1,00125	0,996128	1,01039

Примечание. Здесь и далее ч — частица, а — античастица.

ные из формул

$$\bar{q}_1^2 = \frac{16}{3}\frac{B_s s\beta_1}{\varepsilon_2}\left\{1 - \frac{2}{3}(1-\beta_1^2) + \frac{\beta_1 n_1}{\beta_2 n_2}\frac{q_2^2}{q_1^2}\left[1 - \frac{2}{3}(1-\beta_2^2)\right]\right\}^{-1} \quad (\Delta = 1)$$

и (327)

$$\left(\frac{\bar{q}_2}{\bar{q}_1}\right)^2 = \frac{\frac{16}{3}\frac{s\beta_L}{q_1^2\varepsilon_2}B_s - \left[1 - \frac{2}{3}(1-\beta_1^2)\right]}{\frac{\beta_1 n_1}{\beta_2 n_2}\left[1 - \frac{2}{3}(1-\beta_2^2)\right]} \quad (\Delta = 1), \tag{328}$$

хорошо согласуются со значениями, найденными по формулам для этих величин, имеющим вид

$$q_1^2 = 2\sqrt{8/9}\, sQ_1^2$$

и

$$\frac{q_2^2}{q_1^2} = \frac{\beta_1^2}{\beta_2^2}\frac{(1+\beta_2)^2 n_2^2}{(1+\beta_1)^2 n_1^2}\varepsilon_1(1+t_\nu).$$

Причем и это самосогласование далеко не тривиально.

Соотношение параметров устойчивых состояний

Как уже упоминалось, протон — оптимальная частица первого ряда, у которой фундаментальное квантовое число $K = 7 \cdot 19 = 133$, — и антипротон принадлежат к одному и тому же зарядовому мультиплету ТФП, следовательно, характеризуются одним и тем же значением K. Однако параметры этих частиц находят из разных формул.

Для протона

$$m_n = \frac{\beta_1 k_x s (1-\beta_1^2)^{1/2}}{\beta_2 k_y \varepsilon_{2(1.op.1)}} A_m^*, \tag{329}$$

$$q_{1n} = q_1 \frac{n_1}{n_2(1+t_\nu)\varepsilon_1^{1/2}} \tag{330}$$

$$q_n = q_{1n}\left(1 - \frac{\beta_1(1+\beta_2)n_2}{\beta_2(1+\beta_1)n_1}\sqrt{(1+t_\nu)\varepsilon_1}\right), \tag{331}$$

$$\mu = \frac{q_{1,2}}{|q_{1,2}|}\frac{\beta_1\beta_L}{\varepsilon_1\varepsilon_{2(1.op.1)}}\left[\frac{\varepsilon_1\beta_2 R_2}{\varepsilon_1\beta_1 R_1} + \frac{1 - \frac{\varepsilon_1\beta_2 R_2}{\varepsilon_2\beta_1 R_1}}{1 - \left|\frac{q_2}{q_1}\right|_n}\right], \tag{332}$$

$$\cos\alpha = s\left\{\frac{3}{4}\frac{\beta_1^3 q_1^2\beta_L}{(1+\beta_1)^2}\left[1 + \frac{\beta_1 n_2(1-\beta_1^2)}{\beta_2 n_1(1-\beta_2^2)}(1+t_\nu)\varepsilon_1^{-1}\right]\right\}^{-1} \tag{333}$$

Соответственно для антипротона

$$m_n = \frac{\beta_1 k_x s (1-\beta_2^2)^{1/2}}{\beta_2 k_y \varepsilon_{2(1.op.1)}} A_m^*, \tag{334}$$

* Формула для A_m приведена в табл. 7.

$$q_{1n} = q_1 \left[\frac{(1+t_\nu)}{(1+t_\nu)_{op}} \frac{\varepsilon_{1(1.op.1)}^{1/2}}{\varepsilon_{2(1.op.1)}^{1/2}} \right]^{1/2}, \tag{335}$$

$$q_n = q_{1n} \left[1 - \frac{\beta_1 (1+\beta_2)}{\beta_2 (1+\beta_1) \sqrt{(1+t_\nu)}} \right], \tag{336}$$

$$\mu = \frac{q_{1,2}}{|q_{1,2}|} \frac{\beta_1 \beta_L}{\varepsilon_1 \varepsilon_{2(1.op.1)}} \left[\frac{\varepsilon_1 \beta_2 R_2}{\varepsilon_2 \beta_1 R_1} + \frac{1 - \frac{\varepsilon_1 \beta_2 R_2}{\varepsilon_2 \beta_1 R_1}}{1 - \left| \frac{q_2}{q_1} \right|_n} \right], \tag{337}$$

$$\cos \alpha = s \left\{ \frac{3}{4} \frac{\beta_1^3 q_1^2 \beta_L}{(1+\beta_1)^2} \left[1 + \frac{\beta_1 n_2 (1-\beta_1^2)}{\beta_2 n_1 (1-\beta_2^2)} (1+t_\nu) \right] \right\}^{-1}. \tag{338}$$

Аргументом для всех этих уравнений, определяющих параметры в безразмерном масштабе, является одно и то же число $K = 133$.

В табл. 5 сведены результаты расчета параметров по этим формулам.

Самосогласование параметров между собой полное. Ни одна другая частица и античастица первого ряда не имеют столь полного самосогласования. Это одна из причин того, что они не образуют своих устойчивых ЭЧВ и своего вакуума. ЭЧВ из всех частиц, входящих в первый ряд возможных состояний, образуют только частица и античастица за № 19, т. е. протон и антипротон.

Во втором ряду нет ни одного состояния, в котором бы реализовалось столь полное самосогласование между параметрами частицы и античастицы или дубль-частицы и антидубль-частицы.

Условие устойчивости, согласно (314), дает наилучшие значения для состояния 5846 во втором ряду. Это состояние и можно считать оптимальным. Однако условие устойчивости выполняется недостаточно точно, и поэтому оптимальная частица второго ряда не имеет своих устойчивых ЭЧВ и, следовательно, своего вакуума. Это видно из численных значений, приведенных в табл. 5.

Таблица 5

Значения основных параметров для оптимальных состояний в первых трех рядах

Параметры (нормализованные)	Первый ряд ($N_{op} = 19$)				Второй ряд	
	частица		дубль-частица		частица	
	ч ($\Delta = 1$)	а ($\Delta = 2$)	ч ($\Delta = 3$)	а ($\Delta = 4$)	ч ($\Delta = 1$)	а ($\Delta = 2$)
m	1836,099	1836,097	1947,15	1941,15	—	26,7373
q_1	1,24052	—1,24059	1,27771	—1,27763	—	1,20321
q	1,00000	—1,00002	1,10568	—1,01507	—	0,999843
J	0,500005	0,500005	0,496826	0,503092	—	0,500
μ	2,792785	—2,79288	2,65688	—3,01304	—	1,02992
ε_1 (ε_{1d})	0,997676		0,997809		0,997751	
ε_2 (ε_{2d})	0,997445		0,997591		0,997527	

Оптимальное состояние третьего ряда 16009 хорошо удовлетворяет условию (314) и имеет хорошее внутреннее самосогласование между параметрами дубль-состояния

$$m_{dn} = m\sqrt{\frac{9}{8}}\frac{s_d}{s}\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_{1(1.op.1)}}, \tag{339}$$

$$q_{1dn} = q_{1d}\frac{\varepsilon_{1(1.op.1)}^{1/4}}{\varepsilon_{2(1.op.1)}^{1/4}}, \tag{340}$$

$$q_{dn} = q_{1dn}\left[1 - \frac{\beta_1(1+\beta_2)n_2(1+t_{vd})^{1/2}}{\beta_2(1+\beta_1)n_1\varepsilon_{1d}^{1/2}}\right], \tag{341}$$

$$\mu_d = \frac{q_{1,2}}{|q_{1,2}|}\frac{\beta_1\beta_L}{\varepsilon_{1(1.op.1)}}\left[\frac{\beta_2 R_2}{\beta_1 R_1} + \frac{1-\frac{\beta_2 R_2}{\beta_1 R_1}}{1-\left|\frac{q_2}{q_1}\right|_{dn}}\right], \tag{342}$$

$$\cos\alpha = s\left\{\frac{\beta_1^3 q_1^3 \beta_L(1+t_{vd})}{\sqrt{2}(1+\beta_1)^2}\left[1 + \frac{\beta_1(1-\beta_1^2)n_1\varepsilon_{1d}}{\beta_2(1-\beta_2^2)n_2(1+t_{vd})}\right]\right\}^{-1}. \tag{343}$$

и параметрами античастицы, которые определяются аналогично параметрам антипротона по формулам

$$m_{dn} = m\sqrt{\frac{9}{8}}\frac{s_d}{s}\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_{1(1.op.1)}}, \tag{344}$$

$$q_{1dn} = q_{1d}\frac{9}{8}\left[\frac{(1+t_{vd})}{2s_{dop}(1+t_{vd})_{op}\varepsilon_{2d}^{1/2}\varepsilon_{2(1.op.1)}}\right]^{1/2}, \tag{345}$$

$$q_{dn} = q_{1dn}\left(1 - \frac{\beta_1(1+\beta_2)}{\beta_2(1+\beta_1)(1+t_{vd})^{1/2}}\right), \tag{346}$$

($N_{op} = 5846$)		Третий ряд ($N_{op} = 16009$)			
дубль-частица		частица		дубль-частица	
ч ($\Delta = 3$)	а ($\Delta = 4$)	ч ($\Delta = 1$)	ч ($\Delta = 2$)	ч ($\Delta = 3$)	а ($\Delta = 4$)
28,3564	—	—	1,00016	1,00000	—
1,27543	—	—	1,20273	1,23793	—
—1,00100	—	—	1,00003	—1,00000	—
0,500	—	—	0,499398	0,499399	—
—0,968312	—	—	1,00286	—1,00116	—
0,997879		0,997752		0,997880	
0,997668		0,997529		0,997670	

$$\mu_d = \frac{q_{1,2}}{|q_{1,2}|} \frac{\beta_1\beta_L}{\varepsilon_{1(1.op.1)}} \left[\frac{\beta_2 R_2}{\beta_1 R_1} + \frac{1 - \frac{\beta_2 R_2}{\beta_1 R_1}}{1 - \left| \frac{q_2}{q_1} \right|_{dn}} \right], \tag{347}$$

$$\cos\alpha = s \left\{ \frac{\beta_1^3 q_1^2 \beta_L}{\sqrt{2}\,(1+\beta_1)^2} \left[1 + \frac{\beta_1}{\beta_2} \frac{(1-\beta_1^2)}{(1-\beta_2^2)} \frac{n_2}{n_1} (1 + t_{vd}) \right] \right\}^{-1}. \tag{348}$$

Полученные численные значения также приведены в табл. 5, где видно, как хорошо согласуются между собой параметры электрона и позитрона.

Представляет собой интерес тот факт, что диэлектрическая проницаемость для частиц вакуума, составленного из электрон-позитронных и протон-антипротонных пар, оказывается практически (в пределах точности расчета) одинаковой. Между тем величины, входящие в формулы для определения ε протон-антипротонного и электрон-позитронного вакуумов, значительно расходятся. Поэтому согласование ε у этих двух основных пар античастиц имеет принципиальное значение. Оно свидетельствует о том, что в вакууме, образованном протон-антипротонными и электрон-позитронными ЭЧВ, одна из важнейших характеристик, непосредственно связанная с метрическими свойствами пространства, одинакова.

Хорошим примером самосогласования внутренних параметров оптимальных частиц может быть и определение угла прецессии протона и электрона не только из формулы

$$\cos\alpha = \frac{s}{\frac{3\beta_1^3 q_1^2}{4\,(1+\beta_1)^2} \left[1 + \frac{\beta_1^3 n_2^2 (1+\beta_2)^2 K_x (1-\beta_2^2)^{1/2}}{\beta_2^3 n_1^2 (1+\beta_1)^2 K_y (1-\beta_1^2)^{1/2}} \left(\frac{q_1^2}{q_2^2} \right)_n \right]}, \tag{349}$$

но и из других условий. Косинус угла α прецессии для протона, найденный из этой формулы, оказывается равным 0, 954 020

Значение угла можно найти и из других физических соображений. Действительно, при наличии прецессии, так сказать, излучающей поверхностью будет поверхность, определяемая равенством

$$M_s = 4\pi R^2 \sin\alpha; \quad k_n = \frac{M_s}{4\pi R^2} = \sin\alpha. \tag{350}$$

Условие равенства ε и μ для вакуума приводит для протона к простой зависимости синуса угла прецессии от других параметров частицы

$$k_n = \sin\alpha = \frac{\pi \beta_1^4 e_W^{3/2} A_\omega^3}{6\sqrt{3}}. \tag{351}$$

Для протона $A_\omega = 1$, поэтому из уравнения мы получаем $\sin\alpha = 0{,}299\,744$ и $\cos\alpha = 0{,}954\,020$, т. е. такое же значение, какое было найдено ранее по другой формуле.

Наблюдаемый в первом подпространстве спин частиц есть проекция механического момента на ось прецессии, т. е.

$$J = s\cos\alpha. \tag{352}$$

Подставляя соответствующие значения, мы получаем для J значение, равное 1/2. Таким же получается спин у антипротона, электрона и позитрона.

Весьма примечательным является и такое самосогласование. Анализируя групповые свойства кристаллов, мы пришли к выводу, что если за струк-

турные свойства атомов, молекул и кристаллов ответственна анизотропия электрического поля, характеризуемая углом прецессии, то для тангенсов этих углов можно получить следующие формулы:

для частиц ядра, т. е. для протонов,

$$\operatorname{tg}\alpha = \frac{2}{9}\sqrt{2} \approx 0,314269, \tag{353}$$

для частиц, расположенных на атомной оболочке, т. е. для электронов,

$$\operatorname{tg}\alpha = \frac{2}{7}\sqrt{2} \approx 0,404061. \tag{354}$$

Находя из этих формул значения косинусов соответствующих углов, мы получим

для протона

$$\cos\alpha_p = 0,95399811,$$

для электрона

$$\cos\alpha_e = 0,92717269,$$

т. е. ранее найденные значения, полученные из совершенно иных соображений.

Весьма любопытно и то, что $\operatorname{tg}\alpha = \frac{2\sqrt{2}}{9} = \frac{1}{3}\sqrt{\frac{8}{9}}$, т. е. равен одной трети от множителя при минимальной массе, который найден из условия устойчивости орбит еще А. Х. Капланом [32].

Внешние параметры всех четырех основных частиц вещества (см. табл. 5) хорошо совпадают с известными опытными значениями, что является свидетельством соответствия теории эксперименту. Наряду с внутренней самосогласованностью это, на наш взгляд, весьма убедительно говорит о справедливости теории.

Мир элементарных частиц как самоорганизующаяся система

Известно, что самое совершенное образование в окружающем нас мире — живая природа — обладает одним из самых эффективных и самых эффектных свойств — способностью к самоорганизации. ТФП показывает, что эта способность не является прерогативой живой природы или планируемых сейчас самоорганизующихся искусственных кибернетических устройств.

Мир элементарных частиц — одна из самых совершенных (если не самая совершенная в веществе) систем, обладающих способностью к самоорганизации. Оптимальные частицы всех трех рядов, имея различные механические моменты, сохраняют с огромной точностью, одинаковой для всех частиц, проекцию момента на ось прецессии, которая у всех частиц равна 1/2.

Но не только оптимальные частицы обладают этим свойством. Любая частица, которая сумеет просуществовать в вакууме время, достаточное для того, чтобы он успел ее нормализовать, будет иметь такой же спин. Следовательно, мир частиц в физическом вакууме, самоорганизуясь, стремится сохранить свой спин, равный половине. И более того, процесс нормализации момента количества движения частиц осуществляется так, что они, переходя из одного состояния в другое, сохраняют спин полуцелым.

У всех еще не нормализованных частиц спин определяется по формуле

$$J_{\max} = \varepsilon\left[s_q \,\mathrm{Ai}\,\frac{(1-\beta_1^2)^{1/2}}{(1-\beta_1^2)^{1/2}_{(1.op.1)}} + 0{,}5\right] + 0{,}5; \quad Ai = \begin{vmatrix} 1, NS = 1; \\ 2, NS \neq 1. \end{vmatrix} \qquad (355)$$

Мир всех возможных состояний частиц огромен. В первом ряду имеется 113 мультиплетов, во втором — 33 215, в третьем — 99 532. Ничтожная часть этих состояний может проявлять себя в первом подпространстве и наблюдается в экспериментах непосредственно. Но во втором подпространстве возможны все состояния, и мы будем фиксировать эти проявления косвенно. В современных квантовых теориях эти состояния получили наименование «виртуальных». Мы сохраним его и в ТФП.

Во втором подпространстве виртуальные состояния ничуть не менее «законны», чем состояния, могущие проявляться в первом подпространстве,— нормальные состояния. Во втором подпространстве между ними нет принципиального различия. Поэтому очень важен результат, полученный в ТФП, согласно которому способность к самоорганизации свойственна всем без исключения состояниям: как нормальным, так и виртуальным. Параметры виртуальных состояний рассчитываются во втором и третьем подпространствах по тем же формулам, что и нормальные. Они также отображаются на

Таблица 6

Значения основных параметров для первых и последних состояний (включая виртуальные) для 1, 2 и 3-го рядов

Параметры (нормализованные)	Первый ряд, $N = 1$				Второй ряд, $N = 1$	
	частица		дубль-частица		частица	
	ч ($\Delta = 1$)	а ($\Delta = 2$)	ч ($\Delta = 3$)	а ($\Delta = 4$)	ч ($\Delta = 1$)	а ($\Delta = 2$)
m	34400,7	34400,7	36479,1	36472,3	145126,2	145126,0
q_1	23,2240	—21,7117	23,9195	—23,9181	6575,11	6295,40
q	0,949257	—1,01527	1,06777	—1,02960	—1,00037	1,00001
J	0,500220	0,499963	0,500060	0,500189	0,500014	0,500001
μ	3,11806	—2,84954	2,93977	—3,08321	—0,977587	1,02648
ε_1 (ε_{1d})	0,999878		0,999885		1,00000	
ε_2 (ε_{2d})	0,999866		0,999874		1,00000	
	$N = 113$				$N = 33215$	
m	269,234	269,220	285,589	283,101	6,25401	6,25350?
q_1	0,182523	—0,243405	0,188018	—0,188008	0,237067	0,312989?
q	0,898690	—0,859134	0,951274	—0,861768	—0,987359	1,00686
J	0	0	0	0	0	0
μ	0	0	0	0	0	0
ε_1 (ε_{1d})	0,982742		0,983717		0,990439	
ε_2 (ε_{2d})	0,981054		0,982123		0,989495	

первое подпространство, но их нельзя или трудно в нем непосредственно зафиксировать.

Поэтому большой интерес представляет способность к самоорганизации частиц, которые еще не обнаружены как первые состояния всех рядов, обладающие очень большой массой, так и виртуальные состояния, которые непосредственно не будут наблюдаться.

В табл. 6 приведены примеры параметров первых и последних состояний в трех рядах возможных состояний частиц. Частицы, входящие в четвертый и высшие ряды, вообще не имеют нормальных состояний. Они могут проявляться только виртуально. Но часть рядов имеет достаточно устойчивые оптимальные состояния, которые могут участвовать в образовании своих частиц вакуума. Эти ЭЧВ вообще не имеют нормальных состояний и не могут образовать пары отдельно существующих нормальных (не виртуальных) частиц. По мнению Н. И. Кобозева [55], эти ЭЧВ играют существенную роль в процессах формирования памяти и мышления у высших животных.

Если дальнейшее развитие науки покажет, что Кобозев прав, то связь между самоорганизацией на уровне ЭЧ и ЭЧВ и самоорганизацией в живой природе окажется далеко не символической. Авторы не исключают того, что идея Н. И. Кобозева окажется правильной.

Второй ряд, $N = 1$		Третий ряд, $N = 1$			
дубль-частица		частица		дубль-частица	
ч ($\Delta = 3$)	а ($\Delta = 4$)	ч ($\Delta = 1$)	а ($\Delta = 2$)	ч ($\Delta = 3$)	а ($\Delta = 4$)
153893,7	153893,7	14003,1	14003,1	14849,1	14849,1
7182,80	6973,97	17741,6	17227,4	19086,4	19085,3
—0,999964	0,999397	—0,997668	0,999962	—0,999704	0,999664
0,500013	0,500000	0,5000006	0,500001	0,500005	0,500000
0,971553	1,03267	—1,00470	1,00046	1,00128	1,00340
1,00000		1,00000		1,00000	
1,00000		1,00000		1,00000	
$N = 33215$		$N = 99532$			
6,63420?	6,63370?	0,208655	0,208600?	0,221345	0,221300?
0,259023	0,251492	0,213782	0,297139?	0,233586	0,233571
—1,00658	1,02224	—1,00567	1,01080	—1,01172	1,01066
0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0
0,990984		0,989920		0,990495	
0,990094		0,988927		0,989557	

Сколь велика способность микромира к самоорганизации, видно из сопоставления цифр, приведенных в табл. 6. Заряды фундаментального поля меняются у частиц вдоль ряда и между рядами на много порядков, а разность этих зарядов — электрический заряд — практически сохраняется. Этот известный из опыта факт нигде, кроме ТФП, не находил объяснения.

То же можно сказать и о механическом моменте частиц и его проекции на ось наблюдения — спине. Это свойство микромира и является ответственным за некоторые квантовые законы и необъясненные ранее факты:

1) за принцип Паули, согласно которому два фермиона с одними и теми же параметрами не могут сосуществовать в одной системе. Этот принцип означает в ТФП невозможность совмещения центров и осей прецессии ни у одной из частиц, у которых анизотропия фундаментального поля не погашена. Такими частицами и являются все фермионы как заряженные, так и не заряженные. Составные частицы могут взаимно скомпенсировать анизотропию своих фундаментальных полей, и в первом подпространстве спин у них может быть целым. Наиболее ярким представителем составных частиц являются частицы вакуума, у которых спин равен сумме спинов частицы и античастицы, т. е. равен единице. Частицы вакуума в первом подпространстве вообще не могут проявляться. Другие частицы с целым спином могут проявлять все виды взаимодействий, но они не обладают анизотропией фундаментального поля и поэтому, во-первых, безразличны к взаимному совмещению — не подчинены принципу Паули, во-вторых, не могут участвовать в формировании структуры вещества атомов, молекул, кристаллов без фермионов. В то же время фермионы без бозонов могут создавать структурные формы;

2) за существование частиц с одинаковым спином, но сильно отличающимися массами;

3) за существование частиц с разными массами и характером взаимодействий, но имеющих один и тот же электрический заряд.

Глава

ПРИНЦИП СООТВЕТСТВИЯ В ТФП

Оптимальный алгоритм для расчета параметров частиц [12]

Для расчета удобно делить параметры частиц на внутренние и внешние. К внутренним относятся параметры частиц во втором и третьем подпространствах с учетом их отражения на первое подпространство, к внешним — наблюдаемые в первом подпространстве. В рамках такого несколько искусственного деления внутренние параметры могут быть найдены из решения системы уравнений

$$n_1\beta_1 - n_2\beta_2 = 2\pi K, \tag{356}$$

$$n_1 = n + \frac{K_1}{2}, \tag{357}$$

$$n_2 = n - \frac{K_1}{2}, \tag{358}$$

Таблица 7

Расчетные формулы параметров ЭЧ для ЭВМ

№ п/п	Параметры	A	B
1	K, K_1 A	$K = 1;\ 2;\ 3;\ \ldots$	$K_1 = 2\,[\varepsilon\,(\pi K) + 1]$
2	NS, N_m K_p, K_{1p}	NS (№ ряда) равен порядковому № A	K_p, K_{1p} — первые значения K и K_1 в каждом ряду
3	β_0, n_0 n, ν	$(1-\beta_0^2) \approx 6A$	$n_0 \approx \varepsilon\left\{0{,}5 + \frac{[1+\sqrt{1+8(1}}{4\,(1-\beta_0^2}\right.$
4	n_1, n_2 β_{1p}, β_{2p}	$n_1 = n + \frac{K_1}{2}$	$n_2 = n - \frac{K_1}{2}$
5	$\Delta\beta, \beta_p$ $F, F(n)$	$\Delta\beta = \frac{K_1\,[(1-\beta) - A]}{2n}$	$(1-\beta) = \frac{(1-\bar{\beta}_{1p}) + (1-\bar{\beta}_{2p})}{2}$
6	β_L, β β_1, β_2	$(1-\beta_L) = (1-\beta) + \frac{3\,(\Delta\beta)^2}{2\beta}$	$\frac{R_2}{R_1} = \frac{\beta_2 n_2}{\beta_1 n_1}$
7	k_x, Q_1^2 k_y, n_W	$k_x = n_1\,(1-\beta_1^2)^{3/2}$	$Q_1^2 = \frac{3k_x^2}{\pi K \beta_1^2\,(1-\beta_1^2)}$
8	A_1, A_2 $f\,(g_{00})\ A_m$	$A_1 = \left[\frac{k_x \beta_1 s}{k_y \beta_2}\,(1-\beta_1^2)\right]_{1.\,op.\,1}$	$A_2 = \left[\frac{k_x \beta_1^3 S}{k_y \beta_2^3}\,(1-\beta_2^2)\right]_{1.\,op.\,1}$
		Частицы ($\Delta = 1$) и античастицы ($\Delta = 2$)	Дубль-части
9	t_ν $t_{\nu d}$	$t_\nu = \frac{nK_1\,[(1-\beta_1) - A]}{2\pi n_2 k_x}$	$t_{\nu d} = \frac{8}{9}$
10	s, s_d s_i, s_0	$s = \frac{1}{\sqrt{2}}\,\frac{\beta_1^3 Q_1^2}{(1+\beta_1)^2}\left[1 + \frac{\beta_2 n_2\,(1-\beta_1^2)\,(1+t_\nu)\,\varepsilon_1}{\beta_1 n_1\,(1-\beta_2^2)}\right];$	$s_d = \frac{1}{\sqrt{}}$
11	ε_1 ε_{1d}	$\varepsilon_1 = \left(1 + A_1\,\frac{\beta_2 k_y}{\beta_1^3 k_x s}\right)^{-1}$	$\varepsilon_{1d} = \left(1\right.$
12	ε_2 ε_{2d}	$\varepsilon_2 = \left(1 + A_2\,\frac{\beta_2 k_y}{\beta_1^3 k_x s}\right)^{-1}$	$\varepsilon_{2d} = \left(1\right.$
13	N_{op} $N_{d\,op}$	$N_{op} = \varepsilon\left(\frac{A_0 n}{1 + \frac{A_0 K_{1p}}{2}} + 0{,}5\right),$ где	$N_{d\,o}$ гд
	A_0 A_{od}	$A_0 = \frac{3\,(1-\beta_2^2)^{1/2}\,(1+\beta_2)}{4\pi K_p \beta_2 \varepsilon_1^{1/2} \varepsilon_2^{1/2}}$	$A_{}$
	q_1	$q_1 = \left(\frac{8}{9}\right)^{1/4}(2s)^{1/2} Q_1, \quad \Delta = 1;$ $q_1 = A\left(\frac{8}{9}\right)^{1/4}(2s)^{1/2} Q_1, \quad \Delta = 2; \quad A_{} = \begin{cases} -1, \\ \end{cases}$ NS = 1;	q_{1} q_{1d}

Окончание таблицы 7

№ п/п	Параметры	A	B
15	$\frac{q_2^2}{q_1^2}$ $\left(\frac{q_2^2}{q_1^2}\right)_d$ $\left(\frac{q_2^2}{q_1^2}\right)_n$ $\left(\frac{q_2^2}{q_1^2}\right)_{dn}$	$\frac{q_2^2}{q_1^2} = \frac{\beta_1^2(1+\beta_2)^2 n_2^2 \varepsilon_1}{\beta_2^2(1+\beta_1)^2 n_1^2}(1+t_\nu)$, $\Delta = 1$; $\frac{q_2^2}{q_1^2} = \frac{\beta_1^2(1+\beta_2)^2}{\beta_2^2(1+\beta_1)^2(1+t_\nu)}$, $\Delta = 2$; $\left(\frac{q_2^2}{q_1^2}\right)_n = \frac{q_2^2}{q_1^2}$, $\Delta = 1;\ 2$	$\left(\frac{q_2^2}{q_1^2}\right)_d = \frac{\beta_1^2(1+\beta_2)^2 n_2^2}{\beta_2^2(1+\beta_1)^2 n_1^2 \varepsilon_{1d}}(1+t_\nu)$, $\Delta = 3$; $\left(\frac{q_2^2}{q_1^2}\right)_d = \frac{\beta_1^2(1+\beta_2)^2}{\beta_2^2(1+\beta_1)^2(1+t_{\nu d})}$, $\Delta = 4$; $\left(\frac{q_2^2}{q_1^2}\right)_{dn} = \left(\frac{q_2^2}{q_1^2}\right)_d$, $\Delta = 3;\ 4$
16	q, q_d q_n, q_{dn}	$q = q_1\left(1 - \left\lvert\frac{q_2}{q_1}\right\rvert\right)$ $q_n = q_{1n}\left(1 - \left\lvert\frac{q_2}{q_1}\right\rvert\right)_n$	$q_d = q_{1d}\left(1 - \left\lvert\frac{q_2}{q_1}\right\rvert\right)_d$ $q_{dn} = q_{1dn}\left(1 - \left\lvert\frac{q_2}{q_1}\right\rvert\right)_{dn}$
17	μ μ_d μ_0	$\mu = \frac{q}{\lvert q\rvert}\frac{\beta_1\beta_L}{\varepsilon_1\varepsilon_{2(1.op.1)}}\left[\frac{\varepsilon_1\beta_2 R_2}{\varepsilon_2\beta_1 R_1} + \frac{1 - \frac{\varepsilon_1\beta_2 R_2}{\varepsilon_2\beta_1 R_1}}{1 - \left\lvert\frac{q_2}{q_1}\right\rvert_n}\right]$	$\mu_d = \frac{q}{\lvert q\rvert}\frac{\beta_1\beta_L}{\varepsilon_{1(1.op.1)}}\left[\frac{\beta_2 R_2}{\beta_1 R_1} + \frac{1 - \frac{\beta_2 R_2}{\beta_1 R_1}}{1 - \left\lvert\frac{q_2}{q_1}\right\rvert_{dn}}\right]$
18	m, m_d m_i, m_0 m_n, m_{nd} m_{in}, m_{on}	$m = \frac{\beta_1 k_x}{\beta_2 k_y}\frac{s(1-\beta_2^2)^{1/2}}{\varepsilon_2}A_m$ $m_n = m\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_{2(1.op.1)}}$	$m_d = m\frac{s_d}{s}\sqrt{\frac{9}{8}}\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_{2d}}$ $m_{dn} = m_d\frac{\varepsilon_{2d}}{\varepsilon_{1(1.op.1)}}$
19	J, J_d J_j, J_0	$J_q = s_q\left\{\frac{\sqrt{2}A_\nu\beta_1^3 Q_1^2}{(1+\beta_1)^2\beta_L^{-1}}\left[1 + A_J\frac{\beta_1^3 n_2^2(1+\beta_2)^2}{\beta_2^3 n_1^2(1+\beta_1)^2}\left(\frac{q_1}{q_2}\right)^2_{qn}\right]\right\}^{-1}$ где $A_J = \frac{k_x(1-\beta_2^2)^{1/2}}{k_y(1-\beta_1^2)^{1/2}}$; $A_\nu = \begin{cases}1, & \Delta = 1-4, \\ 1+t_\nu, & \Delta = 1 \\ 1, & \Delta = 2;\ 4 \\ 1+t_{\nu d}, & \Delta = 3\end{cases}$ $\Bigg\vert\begin{matrix}NS = 1\\ \\ NS \neq 1\end{matrix}$	
20	τ τ_d τ_i τ_0 τ_n τ_{dn} τ_{in} τ_{0n}	$\tau = \frac{4s\left(1 - \frac{m_{(N+1)}}{m_{(N)}}\right)(1-\beta_1^2)^{1/2}}{s_{d\,(3.\,op.\,3)}\left\lvert 1 - \frac{q_n^2}{q^2}\right\rvert(1-\beta_1^2)^{1/2}_{(1.op.1)}}$ $\tau_n = \frac{4s\left(1 - \frac{m_{n\,(N+1)}}{m_{n\,(N)}}\right)(1-\beta_1^2)^{1/2}}{s_{d\,(3.\,op.\,3)}\left\lvert 1 - \frac{q_n^2}{q^2}\right\rvert(1-\beta_1^2)^{1/2}_{(1.op.1)}}$	$\tau_d = \frac{4s_d\left(1 - \frac{m_{d\,(N+1)}}{m_{d\,(N)}}\right)(1-\beta_1^2)^{1/2}}{s_{d\,(3.\,op.\,3)}\left\lvert 1 - \frac{q_n^2}{q^2}\right\rvert_d(1-\beta_1^2)^{1/2}_{(1.op.1)}}$ $\tau_{dn} = \frac{4s_d\left(1 - \frac{m_{dn\,(N+1)}}{m_{dn\,(N)}}\right)(1-\beta_1^2)^{1/2}}{s_{d\,(3.\,op.\,3)}\left\lvert 1 - \frac{q_n^2}{q^2}\right\rvert_d(1-\beta_1^2)^{1/2}_{(1.op.1)}}$
21	τ_{kp}	$\frac{2\left(1 - \frac{m_{(N+1)}}{m_{(N)}}\right)(1-\beta_1^2)^{1/2}}{\left\lvert q^2_{3n}\right\rvert} \geqslant 1$, $\Delta = 1;\ 2$	$\frac{2\left(1 - \frac{m_{d\,(N+1)}}{m_{d\,(N)}}\right)(1-\beta_1^2)^{1/2}}{\left\lvert q^2_{3n}\right\rvert} \geqslant 1$; $\Delta = 3;\ 4$

$$n_1 = \varepsilon\left[\frac{\left(\sqrt{1+8(1-\bar{\beta}_1^2)}+1\right)^{3/2}}{4(1-\bar{\beta}_1^2)^{3/2}}+0{,}5\right], \tag{359}$$

$$n_2 = \varepsilon\left[\frac{\left(\sqrt{1+8(1-\bar{\beta}_2^2)}+1\right)^{3/2}}{4(1-\bar{\beta}_2^2)^{3/2}}+0{,}5\right], \tag{360}$$

где ε — entier (целая часть числа).

$$K_1 = 2\varepsilon[\pi K + 1], \tag{361}$$

$$F(n-1) > F(n) \geqslant 0 > F(n+1), \tag{362}$$

где

$$F(n) = \frac{n_1}{2n}\left[(1-\bar{\beta}_1) - \frac{n_2}{n}(1-\bar{\beta}_2) - \frac{K_1}{n_1}\left(1-\frac{2\pi K}{K_1}\right)\right].$$

$$(1-\bar{\beta}_1) - (1-\beta_1) = (1-\beta_2) - (1-\bar{\beta}_2). \tag{363}$$

В приведенных восьми уравнениях имеется девять неизвестных. Одному из них, целочисленному параметру K, присваиваются последовательно значения 1, 2, 3 . . . натурального ряда чисел и проверяется, при каких значениях K система из восьми уравнений с восемью неизвестными имеет совместные корни. Число возможных решений ограничивается как предварительными, так и окончательными критериями отбора.

Для каждого K, удовлетворяющего указанным условиям, находятся определяемые в задаче величины. Часть их используется для нахождения окончательного критерия отбора искомых значений вычисляемых величин. Особенностью данного расчета является необходимость сохранения максимального числа значащих цифр, чтобы часть их не терялась в разностях между очень близкими числами. Частично это достигается специальной записью расчетных формул, но избежать расчета с большой разрядностью не удается.

При составлении алгоритма мы пользовались табл. 7.

Алгоритм решения задачи следующий.

Вводится число π с требуемой степенью точности. Вступает в действие первый критерий отбора (условие релятивизма)

$$A \leqslant \frac{1}{6\sqrt{2}\,K_p^2}, \tag{364}$$

где $A = 1 - \frac{2\pi K}{K_1}$.

K_p — первые значения K в каждом ряду.

Удовлетворяющие этому критерию значения K с одним и тем же значением A образуют ряд кратных K_p чисел. Каждому ряду присваивается порядковый номер NS и каждому члену ряда—свой номер в ряду NT.

Последний член ряда $K_{\max}$ имеет номер, величина которого численно равна первому значению K в следующем ряду

$$NT_{\max}[NS] = K_p[NS+1]. \tag{365}$$

Поэтому для нахождения искомых рядов достаточно найти их первое значение K_p.

Как более доказательный возможен вариант последовательного перебора значений K, из которых мы выбираем число, удовлетворяющее условию

$$1 - \frac{2\pi K_p}{K_{1p}} \leqslant \frac{1}{6\sqrt{2}\,K_p^2}. \tag{366}$$

Они образуют массив чисел, порождающих новые ряды — K_p $[NS]$, где $NS = 1, 2, 3 \ldots$

Для больших чисел перебор K будет занимать большое машинное время. Поэтому для удобства счета можно воспользоваться известными методами теории чисел. В этой теории известен алгоритм для нахождения наилучших приближений для любого числа x в виде

$$\frac{P_i m + P_{i-1}}{Q_i m + Q_{i-1}} = \frac{t_i}{r_i}, \tag{367}$$

где P_i/Q_i $(i = 0, 1, 2 \ldots)$ — подходящие дроби к действительному числу, т. е.

$$\begin{aligned} P_{i+1} &= P_{i-1} + b_{i+1}P_i, \\ Q_{i+1} &= Q_{i-1} + b_{i+1}Q_i. \end{aligned} \tag{368}$$

Здесь $b_{i+1} = \varepsilon\,[a_{i+1}]$, $a_{i+1} = \dfrac{1}{a_i - b_i}$, $a_0 = x$, $P_{-2} = 0$, $Q_{-2} = 1$, $P_{-1} = 1$, $Q_{-1} = 0$, $P_0 = \varepsilon\,[x]$, $Q_0 = 1$. Величина m принимает такие целочисленные значения, что $0 \leqslant m \leqslant b_{i+1}$.

Отношение t_i/r_i при нечетном индексе дает приближение к x с недостатком; при четном — с избытком.

Можно показать, что для t_i/r_i выполняется неравенство

$$\left| x - \frac{t_i}{r_i} \right| < \frac{1}{Q_{i-1}^2} \quad (i > 1). \tag{369}$$

Мы интересуемся случаем приближения к π с избытком отношения $K_1/2K$. При этом наилучшие приближения будут удовлетворять условию (с учетом (369))

$$1 - \frac{2\pi K_{p_i}}{K_{1p_i}} < \frac{1}{6Q_{i-1}^2}, \tag{370}$$

где $K_{p_i} = Q_i m + Q_{i-1}$ — текущее значение K_p, $K_{1p_i} = P_i m + P_{i-1}$.

Однако полученное неравенство (как можно доказать) слабее условия релятивизма (366), и, следовательно, не каждое наилучшее приближение порождает свой ряд.

Но теперь перебор значений K сводится к проверке условия (366) для лучших приближений, построенных, согласно аппарату цепных дробей, по уравнениям (367) и (368).

Для каждого ряда по значению K_p^* находят величины n и $(1 - \beta)$, которые сохраняются для всех K в данном ряду. Они образуют массивы чисел $n[NS]$, $B[NS]$, где $NS = 1, 2, 3 \ldots$

---

* Здесь K, n, n_1, n_2 — целые числа.

Значение n должно удовлетворять условию минимальности (362), а также неравенству

$$n_0 + 2^{\nu} > n > n_0 - 2^{\nu};\ \nu = 4 - \varepsilon\left[\frac{\lg A}{\lg 4}\right]. \tag{371}$$

Это позволяет найти значение n (численно равное целому числу) методом половинного деления. Алгоритм приведен на блок-схеме (рис. 5).

После нахождения значений K_p $[NS]$ для $NS = 1, 2, 3$ (т. е. K_p и $NT_{\max}$ первых трех рядов) определяются некоторые «оптимальные» величины 1-го и 3-го ряда, присутствующие в вычислениях внешних параметров частиц любого ряда. Эти величины соответствуют значениям N_{op} и N_{dop}, получаемым методом итерации. Начальное значение $N = 1$. Последовательность вычисления их представлена на рис. 5. (См. вклейку к стр. 57).

Для сохранения возможно большего числа знаков величины s и ε_1, s_d и ε_{1d} находятся методом итерации. Начальные значения $\varepsilon_1 = 1$ и $\varepsilon_{1d} = 1$. (В случае первого ряда при нахождении N_{op} лучшими начальными значениями являются $\varepsilon_1 = \beta_1{}^2$, $\varepsilon_2 = \beta_2{}^2$.) Итерации проводятся до тех пор, пока s и s_d не будут получены с требуемой точностью.

Каждому порядковому номеру данного ряда соответствует свой зарядовый мультиплет возможных состояний частиц. Жизнеспособность того или иного вида частиц определяется по критериям существования.

Если

$$F \leqslant \frac{K(1-\beta_1^2)^3}{8s_i}, \tag{372}$$

то можно ожидать, что K будет одним из возможных решений и в задаче могут быть первые и вторые корни (частица и античастица).

Если

$$F \leqslant \frac{K(1-\beta_2^2)^3}{8s_d}, \tag{373}$$

то при данном K могут быть «третьи» и «четвертые» корни (дубль и антидубль-частицы).

В каждом мультиплете в принципе возможно 8 состояний частиц, массы и заряды которых вычисляются, согласно формулам табл. 7.

Используя окончательный критерий отбора наблюдаемых частиц для каждой массы m $[\Delta, r]$ в виде

$$\frac{2\left(1-\dfrac{m1[\Delta,r]}{m[\Delta,r]}\right)(1-\beta_1^2)^{1/2}}{\pi\left|1-\dfrac{q_n[\Delta]}{q[\Delta]}\right|(1-\beta_1^2)^{1/2}_{1.op}} \geqslant 1, \tag{374}$$

где $m[\Delta, r]$ — соответствующая масса для текущего номера NT; $m1[\Delta, r]$ — та же масса, но для номера $NT + 1$, мы отбираем только те состояния, масса частиц которых прошла этот критерий. На печать выводятся (кроме массы, прошедшей критерий) параметры, характеризующие частицу.

Пользуясь условием (358)

$$m1[\Delta, r] = 0 \qquad (\text{для } NT = NT_{\max} + 1), \tag{375}$$

удобно проводить отбор наблюдаемых частиц в каждом ряду, начиная с $NT = NT_{\max}$.

Перед тем как непосредственно вычислить требуемые параметры наблюдаемых частиц в каждом ряду, нужно найти оптимальные величины для этого ряда $(1 + t_v)_{op}$, $(1 + t_{vd})_{op}$, которые необходимы для определения внешних и внутренних параметров этих частиц.

С помощью счетчика j происходит остановка программы. Равенство

$$j = 0 \tag{376}$$

означает, что в найденном ряду не оказалось ни одной наблюдаемой частицы (ни одна из них не прошла критерий (374)).

Физическая и математическая основы этого алгоритма понятны из предыдущего. Нам представляется только уместным обратить внимание на следующие его особенности.

1. Алгоритм не содержит ни одной величины, взятой из опыта или произвольно установленной как подгоночный коэффициент.

2. Для определения всех значений K и K_1 в алгоритме можно использовать аппарат цепных дробей в соответствии с рассмотренной методикой. Для проверки правомерности методики применен метод перебора. $K = 1, 2, 3 \ldots$ с тем, чтобы выяснить, при каких его значениях удовлетворяется условие (365). Расчет показывает полное совпадение отобранных K по обеим методикам.

3. В процессе расчета проверяется точность квазиклассического приближения (в котором ведется расчет) и решения, не удовлетворяющие этому условию, отбрасываются как неверные. Таким образом, расчет должен рассматриваться как совершенно строгий в рамках квантовой теории, поскольку он ведется по формулам квазиклассического приближения, но с точностью, которую допускает для этого расчета квантовая теория фундаментального поля.

4. Большую роль в расчете играют константы ТФП, характеризующие физические свойства вакуума. Они определяются из параметров оптимальных частиц в основном первого («протонного») и третьего («электронного») рядов, которые и образуют основу физического вакуума. Эти величины находят из основных расчетных формул, также без привлечения каких бы то ни было произвольных или взятых из эксперимента чисел.

5. В качестве критерия окончательного отбора частиц, параметры которых определяются данным алгоритмом, использован критерий, найденный в [8].

Рассматриваемый здесь математический алгоритм для расчета параметров элементарных частиц отрабатывался на отечественных машинах. Контрольная проверка была произведена на машине американской фирмы ИБМ системы 360, модель 50. Алгоритм в таком виде является достаточным для полного решения задачи.

Расчетные формулы и результаты вычисления параметров ЭЧ и ЭЧВ

Некоторые из рассмотренных формул пригодны непосредственно для расчета, а другим желательно придать более удобный вид, особенно учитывая методику расчета на ЭВМ.

Для удобства выполнения расчета основные формулы сведены нами в табл. 7, а блок-схема расчета на ЭВМ приведена на рис. 5.

Формулы имеют порядковый номер и букву (например, формула для A имеет № 1 C).

В таблице использованы следующие обозначения:

K, K_1, A — фундаментальный квантовый параметр и его прямые функции;
NS — номер ряда, в котором находится данный зарядовый мультиплет частиц;
N_m — максимально возможный номер мультиплета в данном ряду;
K_p и K_{1p} — первые значения K и K_1;
N — номер мультиплета в этом ряду;
β_0, n_0, ν — вспомогательные величины, введенные для удобства расчета;
n_1, n_2 — число субчастиц в расчетной модели на наружной и внутренней окружностях;
β_{1p}, β_{2p} — линейные скорости движения субчастиц в c, для первого члена данного ряда;
$\Delta\beta$ — величина, характеризующая отличие линейных скоростей от среднего значения скорости $\beta = \frac{\beta_1 + \beta_2}{2}$, в единицах c;
$F(n)$ — функция F, характеризующая величину неопределенности в определении β для соответствующего значения n;
Q_1, k_x, k_y, A_1, A_2, A_m, t_ν — вспомогательные функции;
n_W — концентрация частиц в вакууме первого подпространства;
s — механические моменты частиц для соответствующих состояний;
ε_1, ε_2, ε_{1d}, ε_{2d} — эффективные диэлектрические проницаемости вакуума для разных состояний, которые имеют различное значение вследствие того, что вакуум по-разному возмущается частицами, и это определяет изменение эффективных значений ε;
op — индекс, характеризующий принадлежность к оптимальному состоянию;
3. op. 3; 1. op. 1 — обозначения в периодическом законе микрочастиц: первая цифра соответствует номеру ряда, вторая — номеру мультиплета, третья — номеру состояния в данном мультиплете;
q_1, q_2, q_{1d} — заряды фундаментального поля, в единицах $\sqrt{\hbar c}$;
μ — магнитные моменты, в собственных магнетонах;
m — масса, в массах электрона;
J — спин (проекция s на ось ориентации), в $\hbar$.

Формулы, которые позволяют определить значение мировых констант, приведены в табл. 8. Большую часть из них легко получить непосредственно из уже рассмотренных. Вывод не тривиальных формул нам представляется целесообразным дать в этом параграфе.

По физическому смыслу постоянная излучения R_∞, введенная Ридбергом, есть отношение максимальной частоты, которую может излучить данная частица, к скорости света, т. е.

$$R_\infty = \frac{\nu_{\text{изл. max}}}{c}. \tag{377}$$

В собственной системе координат первая гармоника, которую может излучить частица, соответствует ее собственной частоте ν_0. На первое подпространство эта частота отобразится для электрона (дубль-частица) в виде

$$\nu_{\text{изл. max}} = \sqrt{\frac{9}{8}}\, 2s_d (1 - \beta_2^2)^{1/2} \nu_{01}. \tag{378}$$

Поскольку

$$R_1 = \frac{2s_d\hbar\beta_2}{mc\varepsilon_{2p}} \quad \text{и} \quad \nu_{01} = \frac{\beta_1 c}{2\pi R_1},$$

$$R_\infty = \sqrt{\frac{9}{8}}\,\frac{\beta_1\varepsilon_{2p}mc\,(1-\beta_2^2)^{1/2}}{\beta_L\hbar}. \tag{379}$$

Подставляя соответствующие значения величин, входящих в уравнение (379), для электрона (оптимальная частица третьего ряда) получим численное значение постоянной Ридберга, приведенное в таблице и соответствующее эксперименту.

Поскольку между R_∞ и другими мировыми константами существует давно известная связь

$$R_\infty = \frac{2\pi^2 m_e e^4}{ch^3}, \tag{380}$$

из (380) и (377) получим

$$\alpha = \sqrt{\frac{3\varepsilon_{2p}\,(1-\beta_2^2)_e^{1/2}}{2^{1/2}}}. \tag{381}$$

Эта формула позволяет определить α с наибольшей точностью, поскольку содержит очень малое число входящих в нее величин (см. табл. 8).

В табл. 7 заряды частиц, выраженные в единицах $\sqrt{\hbar c}$ и, следовательно, равные $\sqrt{\alpha}$, определяются по формуле $q = q_1 - q_2$.

Для облегчения их сравнения в табл. 9, в которой приведены примеры результатов расчета, значение заряда, вычисленное в единицах $\sqrt{\hbar c}$, разделено на численное значение корня $\sqrt{\alpha} = 8{,}5424357\cdot10^{-2}$, которое получено из значения α, найденного из (381).

Формулу для вычисления константы гравитации, приведенную в табл. 8, легко получить из содержащихся в данной работе соотношений, если учесть следующее свойство вакуума, ответственное за гравитационные взаимодействия [19].

В ТФП рассматривается ранее неизвестное свойство физического вакуума нашего пространства, которое, в отличие от гипотезы, заложенной в основу закона Ньютона и ОТО, не является пустым и обеспечивает гравитационные взаимодействия между всеми телами. Это свойство позволяет не только рассчитывать само взаимодействие при любых полях, но и произвести теоретический расчет гравитационной константы и объясняет (а не постулирует, как в ОТО), почему нет различия между «гравитационной» и «инертной» массами. Это свойство физического вакуума заключается в том, что он оказывает всестороннее давление на элементарные частицы и составленные из них атомы, молекулы и тела. Небольшая часть этого давления экранируется любой элементарной частицей (атомом, молекулой, телом). Размер и степень прозрачности экрана являются свойством данной частицы (атома, молекулы, тела) и зависят от их инертной массы. Поскольку телесный угол, под которым виден эквивалентный для данной частицы, полностью непрозрачный экран, обратно пропорционален квадрату расстояния, а экранирование всестороннего сжатия вызывает силы притяжения, это свойство приводит к гравитационному взаимодействию.

Таблица 8

Расчетные формулы и результаты расчета некоторых мировых констант

Обозначение	Расчетная формула	Рассчитанная величина и размерность
Концентрация протон-антипротонного вакуума	$n_W = \dfrac{1}{8\pi^2 R_1^3}$ $(\zeta = 1)$	$n_W = 1{,}54541 \cdot 10^{39}$ $см^{-3}$
Скорость распространения сигнала в вакууме	$v_W = \sqrt{\mathfrak{G}/\rho}$, где $\mathfrak{G} = \dfrac{m\beta_1^2 c^2}{8\pi^2 R_W^3 \varepsilon_W}$, $\rho = m/8\pi^2 R_W^3$ $(\zeta = 1)$	$v_W = c$ $см/сек$
Инвариант действия	$\hbar_W = \dfrac{4\pi^2 q_1^2 \beta_1^2}{3c\,(1+\beta_1)^2}$ $(\zeta = 1)$	$\hbar_W = \hbar$ $эрг \cdot сек$
Константа гравитационного взаимодействия	$G = A_g \dfrac{9}{32\pi^2} (\lambda_p R_\infty)^4 \dfrac{e^2}{m_p^2}$, $A_g = \left(\dfrac{k_y \beta_2}{k_x \beta_1}\right)_p^2 = 1{,}000888$	$G = 6{,}67339 \cdot 10^{-8}$ $см^3/г \cdot сек^2$
Константа слабого взаимодействия	$\alpha_1 < \dfrac{\alpha}{n_1^2}$ $(\zeta = 1)$	$\alpha_1 < 2{,}5 \cdot 10^{-8}\,\alpha$ для протона
Константа электромагнитного взаимодействия	$\alpha = \sqrt{\dfrac{3\varepsilon_W (1-\beta_2^2)_e^{1/2}}{2^{1/2}}}$ $(\zeta = 1)$	$\alpha = 7{,}297321 \cdot 10^{-3}$
Константа сильного взаимодействия	$\alpha_2 = \dfrac{(q_1+q_2)^2}{\hbar c}$ $(\zeta = 2)$	$\alpha_2 = 5{,}14723$ для протона
Константа сверхсильного взаимодействия	$\alpha_3 = \alpha_2 \dfrac{8n_1^2}{K}$ $(\zeta = 3)$	$\alpha_3 = 2{,}41016 \cdot 10^8$ для протона
Постоянная Ридберга	$R_\infty = \sqrt{\dfrac{9}{8}} \dfrac{\beta_1 \varepsilon_W m_e c}{\hbar} (1-\beta_2^2)_e^{1/2}$ $(\zeta = 1)$	$R_\infty = 1{,}09738 \cdot 10^5$ $см^{-1}$ для электрона

Гравитационная константа целиком определяется из структурных параметров элементарных частиц и оказывается одинаковой для всех частиц. В ТФП она выражается через инертную массу и поэтому различие между гравитационной и инертной массами принципиально отсутствует.

Гравитационное взаимодействие возникает между элементарными частицами, а взаимодействие между атомами, молекулами, телами, составленными из элементарных частиц, происходит как интегральный эффект от всех элементарных частиц. В связи с этим на расстояниях, сопоставимых со структурными размерами элементарных частиц, гравитационное взаимодействие

существенно отличается от законов тяготения Ньютона и Эйнштейна и характеризуется потенциалом [7]

$$\varphi = G\frac{me^{-R/r}}{r}. \tag{382}$$

У протона телесный угол, под которым «виден» его непрозрачный экран на единице длины, определяется из

$$\theta = \frac{a_G(R_1 - R_2)_p^2}{2r_{\text{ед}}^2} = \frac{a_G l_p^2}{2r_{\text{ед}}^2}; \qquad a_G = \left(\frac{k_y\beta_2}{k_x\beta_1}\right)_p^2. \tag{383}$$

Сила всестороннего давления вакуума на протон равна

$$F_{\text{м}} = \frac{e^2}{r^2\varepsilon_W} = \frac{F_s r_{\text{ед}}^2}{r^2\varepsilon_W}. \tag{384}$$

Тогда из формулы гравитационного взаимодействия протон — протон, написанной в виде

$$F = \frac{\theta}{2\pi}F_{\text{м}} = G\frac{m_p^2}{r^2}, \tag{385}$$

имеем

$$G = \frac{a_G l_p^2}{8\pi r_{\text{ед}}^2\varepsilon_{2p}}\left(\frac{e^2}{m_p^2}\right), \tag{386}$$

что легко переходит в наиболее удобный для расчета вид

$$G = \left(\frac{k_y\beta_2}{k_x\beta_1}\right)_p^2 \frac{9}{32\pi^2}(\lambda\!\!\!^{-}_p R_\infty)^4 \frac{e^2}{m_p^2}. \tag{387}$$

В табл. 9 приведены примеры результатов расчета параметров ЭЧ по формулам, указанным в табл. 7. Найденные численные значения мировых констант даны вместе с расчетными формулами в табл. 8.

Нам представляется, что сравнение теоретически найденных численных значений с соответствующими экспериментальными величинами не требует комментариев. Быть может, имеет смысл упомянуть, что «вероятность случайных совпадений», имеющая в данном случае порядок 10^{-35}, не оставляет места для научного рассмотрения гипотезы о возможности столь «вероятного» события.

При расчете параметров элементарных частиц обнаруживается строгая закономерность, которая в [6—9] названа «периодическим законом микрочастиц» — ПЗМ. Замена термина «элементарная частица» термином «микрочастица» вызвана в данном случае тем, что в упомянутом законе рассматривается главным образом часть свойств ЭЧ, которую они проявляют в первом подпространстве. В ПЗМ не анализируются все свойства на самом деле элементарных, т. е. неделимых, хотя и имеющих структуру, элементарных частиц.

Принципиальная неделимость ЭЧ понятна из физической сущности их структуры. Структурные элементы ЭЧ не могут существовать самостоятельно, так как это не локальные сущности, в которых сконцентрирована материальная субстанция, ответственная за свойства частиц, а центры симметрии, в которых проявляются свойства материальной субстанции, распределенной во всем пространстве. Понятно, что если эти свойства проявляются

в структурной системе ЭЧ, то принципиально невозможно выделить структурные элементы частиц фундаментального поля как изолированно и самостоятельно существующий объект. Поэтому при рассмотрении закономерностей, связанных с систематизацией ЭЧ, правильно применить термин «микрочастица», абстрагируясь от всех сложностей, связанных с понятием о многоструктурной, но неделимой ЭЧ.

На рис. 4 приведен график зависимости наблюдаемой массы микрочастиц от фундаментального квантового числа K. Обе величины взяты в логарифмическом масштабе. На графике даны значения масс только для частиц, которые могут проявляться непосредственно, а виртуальные состояния, которые не проходят критерия отбора (см. в начале этой главы), опущены. Отчетливо видно, что в свойствах частиц существует ярко выраженная, периодически повторяющаяся закономерность.

Кратные значения фундаментального квантового числа K характеризуют ряд частиц, объединенных многими общими свойствами. На графике приведены частицы, принадлежащие первым трем рядам ПЗМ. Однако, как уже было упомянуто, следующие ряды кратных значений K соответствуют очень населенному миру виртуальных частиц, не проявляющихся непосредственно в виде самостоятельно живущих образований, но от этого не лишенных своих свойств и роли в процессах, протекающих в окружающем нас мире.

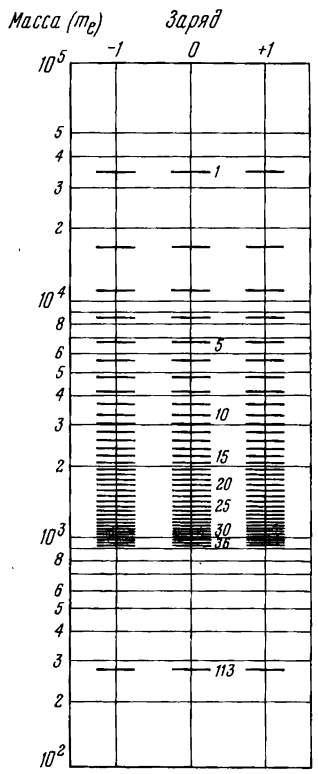


Рис. 6. Спектр масс и зарядов у частиц первого ряда

Внутри каждого ряда ПЗМ имеют место следующие закономерности.

1. Суммарное число зарядов остается неизменным ($n_1 + n_2 = \text{const}$) для всех частиц данного ряда.

2. Наружный радиус частицы монотонно растет от первого до последнего числа ряда. Внутренний радиус, наоборот, монотонно уменьшается. Увеличение наружного радиуса и уменьшение внутреннего примерно пропорционально изменению числа расположенных на них субзарядов.

3. Масса частиц имеет наибольшее значение в первом состоянии и монотонно уменьшается вдоль ряда (рис. 4).

4. Квант действия для процессов, протекающих внутри микрочастиц, одинаков для всех членов данного ряда.

5. Абсолютные значения величин фундаментальных зарядов q_1 и q_2 самые большие у первых членов ряда и монотонно уменьшаются вдоль него.

Вся периодическая система состояний микрочастиц имеет такие основные закономерности.

1. В каждом ряду есть только одно состояние, которое соответствует не только условиям неизлучения (электродинамической устойчивости), но и определенной механической устойчивости. Следовательно, наиболее устойчивых в свободном состоянии (без внешних взаимодействий) микрочастиц столько, сколько рядов. Это состояние в ряду мы и называем оптимальным.

Таблица 9

Каталог элементарных частиц

Обозначение в ПЗМ	Обозначение обычное	K	$1-\beta_1^2$	m	q	J_n	J_{max}	μ	q_1^2
Первый ряд периодического закона микрочастиц (ПЗМ)									
1.1.1(2)				34317,4	1,004(11)	0,5	10,5	3,12(2,85)	
1.1.3(4)				36398,9	1,025(5)	0,5	10,5	2,94(3,08)	
1.1.5(6)		$7\cdot1=7$	$2{,}43327\cdot10^{-3}$	34319,9	0	0,5	10,5	2,12(1,85)	$5{,}39356\cdot10^{2}$
1.1.9				36399,1	0;1,004(11)	0	11	3,12	
1.1.11				38606,9	0;1,025(5)	0	11	2,94	
1.2.1(2)				17183,5		0,5	5,5	3,10(2,85)	
1.2.3(4)				18225,7		0,5	5,5	2,92(3,08)	
1.2.5(6)		$7\cdot2=14$	$2{,}42719\cdot10^{-3}$	17186,0	То же	0,5	5,5	2,10(1,85)	$1{,}35175\cdot10^{2}$
1.2.9				18225,9		0	6	3,10	
1.2.11				19331,3		0	6	2,92	
1.3.1(2)				11471,5		0,5	3,5	3,08(2,84)	
1.3.3(4)				12167,2		0,5	3,5	2,90(3,08)	
1.3.5(6)		$7\cdot3=21$	$2{,}42111\cdot10^{-3}$	11474,0	»	0,5	3,5	2,09(1,86)	$6{,}02214\cdot10^{1}$
1.3.9				12167,3		0	4	3,08	
1.3.11				12905,2		0	4	2,90	
1.4.1(2)				8614,90		0,5	3,5	3,06(2,84)	
1.4.3(4)				9137,31		0,5	3,5	2,89(3,07)	
1.4.5(6)		$7\cdot4=28$	$2{,}41502\cdot10^{-3}$	8617,40	»	0,5	3,5	2,08(1,86)	$3{,}39519\cdot10^{1}$
1.4.9				9137,48		0	4	3,06	
1.4.11				9691,58		0	4	2,89	
1.5.1(2)				6900,50		0,5	2,5	3,04(2,84)	
1.5.3(4)				7318,92		0,5	2,5	2,87(3,07)	
1.5.5(6)		$7\cdot5=35$	$2{,}40894\cdot10^{-3}$	6903,02	»	0,5	2,5	2,07(1,87)	$2{,}17766\cdot10^{1}$
1.5.9				7319,09		0	3	3,04	
1.5.11				7762,89		0	3	2,87	
1.6.1(2)	Σ (3000) ?			5757,21		0,5	2,5	3,02(2,83)	
1.6.3(4)				6106,28		0,5	2,5	2,85(3,06)	
1.6.5(6)		$7\cdot6=42$	$2{,}40286\cdot10^{-3}$	5759,73	»	0,5	2,5	2,05(1,87)	$1{,}51541\cdot10^{1}$
1.6.9				6106,44		0	3	3,02	
1.6.11	X (2500) ?			6476,68		0	3	2,85	

1.7.1(2)	Ξ (2500) ?			4940,26		0,5	1,5	3,00(2,83)	
1.7.3(4)				5239,77		0,5	1,5	2,84(3,06)	
1.7.5(6)	Λ (2585) ?	$7 \cdot 7 = 49$	$2{,}39678 \cdot 10^{-3}$	4942,78	»	0,5	1,5	2,04(1,87)	$1{,}11556 \cdot 10^{1}$
1.7.9				5239,94		0	2	3,00	
1.7.11	X (2500) ?			5557,62		0	2	2,84	
1.8.1(2)	Z 1 (2150) ?			4327,28		0,5	1,5	2,98(2,83)	
1.8.3(4)				4589,61		0,5	1,5	2,82(3,06)	
1.8.5(6)	Λ (2350) ?	$7 \cdot 8 = 56$	$2{,}39070 \cdot 10^{-3}$	4329,81	»	0,5	1,5	2,03(1,88)	8,55708
1.8.9				4589,78		0	2	2,98	
1.8.11	$N\overline{N}$(2375)?			4868,02		0	2	2,82	
1.9.1(2)	N (1990)			3850,29		0,5	1,5	2,96(2,82)	
1.9.3(4)				4083,68		0,5	1,5	2,80(3,05)	
1.9.5(6)		$7 \cdot 9 = 63$	$2{,}38462 \cdot 10^{-3}$	3852,82	»	0,5	1,5	2,02(1,88)	6,77317
1.9.9				4083,85		0	2	2,96	
1.9.11	K^* (2200)			4331,40		0	2	2,80	
1.10.1(2)	Σ''(1750) ?			3468,48		0,5	1,5	2,94(2,82)	
	N'' (1700)								
1.10.3(4)	Σ (1940)?			3678,72		0,5	1,5	2,79(3,05)	
1.10.5(6)		$7 \cdot 10 = 70$	$2{,}37854 \cdot 10^{-3}$	3471,02	»	0,5	1,5	2,04(1,88)	5,49549
1.10.9				3678,88		0	2	2,91	
1.10.11	ρ (2100) ?			3901,87		0	2	2,79	
1.11.1(2)	N'' (1700)			3159,34		0,5	1,5	2,93(2,82)	
1.11.3(4)	N (1780) ?			3350,33		0,5	1,5	2,77(3,04)	
1.11.5(6)		$7 \cdot 11 = 77$	$2{,}37245 \cdot 10^{-3}$	3163,75	»	0,5	1,5	2,00(1,89)	4,54892
1.11.9				3350,98		0	2	2,93	
1.11.11	X (1795)			3553,56		0	2	2,77	
1.12.1(2)	Σ (1480)			2898,02		0,5	1,5	2,91(2,82)	
1.12.3(4)				3073,22		0,5	1,5	2,76(3,04)	
1.12.5(6)		$7 \cdot 12 = 84$	$2{,}36637 \cdot 10^{-3}$	2902,07	»	0,5	1,5	1,98(1,89)	3,82803
1.12.9				3073,82		0	2	2,91	
1.12.11	ω (1675) ?			3259,65		0	2	2,76	
1.13.1(2)				2676,75		0,5	1,5	2,89(2,81)	
1.13.3(4)	N' (1470)			2838,59		0,5	1,5	2,74(3,04)	
1.13.5(6)	Ξ^0	$7 \cdot 13 = 91$	$2{,}36029 \cdot 10^{-3}$	2680,49	»	0,5	1,5	1,97(1,90)	3,26629
1.13.9				2839,12		0	2	2,89	
1.13.11				3010,78		0	2	2,74	

Таблица 9 (продолжение)

Обозначение в ПЗМ	Обозначение обычное	K	$1-\beta_1^2$	m	q	J_n	J_{max}	μ	q_1^2
1.14·1(2)				2486,95	1,004(11)	0,5	1,5	2,87(2,81)	
1.14.3(4)				2637,31	1,025(5)	0,5	1,5	2,73(3,03)	
1.14.5(6)	Ξ^0	7·14=98	$2{,}35421\cdot10^{-3}$	2490,42	0	0,5	1,5	1,96(1,90)	2,82000
1.14.9				2637,81	0; 1,004(11)	0	2	2,87	
1.14.11	X (1410) ? K^* (1420) ?			2797,30	0; 1,025(5)	0	2	2,73	
1.15.1(2)	Σ^+ Σ^-			2322,32		0,5	1,5	2,86(2,81)	
1.15.3(4)				2462,74		0,5	1,5	2,71(3,03)	
1.15.5(6)	Σ^0 ?	7·15=105	$2{,}34813\cdot10^{-3}$	2325,56	То же	0,5	1,5	1,95(1,90)	2,45968
1.15.9				2463,19		0	2	2,86	
1.15.11				2612,13		0	2	2,71	
1.16.1(2)				2178,15		0,5	1,5	2,84(2,80)	
1.16.3(4)				2309,86		0,5	1,5	2,70(3,02)	
1.16.5(6)	Λ^0	7·16=112	$2{,}34205\cdot10^{-3}$	2181,19	»	0,5	1,5	1,94(1,90)	2,16405
1.16.9				2310,28		0	2	2,84	
1.16.11	K_A (1240) ?			2449,98		0	2	2,70	
1.17.1(2)				2050,83	1,003(17)	0,5	1,5	2,82(2,80)	
1.17.3(4)				2174,85	1,010(12)	0,5	1,5	2,68(3,02)	
1.17.5(6)		7·17=119	$2{,}33597\cdot10^{-3}$	2053,69	0	0,5	1,5	1,93(1,91)	1,91890
1.17.9				2175,23	0; 1,003(17)	0	2	2,82	
1.17.11				2306,78	0; 1,010(12)	0	2	2,68	
1.18.1(2)				1937,55		0,5	1,5	2,81(2,80)	
1.18.3(4)				2054,73		0,5	1,5	2,67(3,02)	
1.18.5(6)		7·18=126	$2{,}32989\cdot10^{-3}$	1940,26	То же	0,5	1,5	1,92(1,91)	1,71319
1.18.9				2055,80		0	2	2,81	
1.18 11				2179,37		0	2	2,67	
1.*op*.1(2)	$p^{\pm}$			1836,10	1,00002	0,5	1,5	2,7928(2,7929)	
1.*op*.3(4)				1947,13	1,02(8)	0,5	1,5	2,6569(3,0130)	
1.19.5(6)	$n\tilde{n}$	7·19=133	$2{,}32380\cdot10^{-3}$	1838,66	0	0,5	1,5	1,9136(1,9137)	1,53888
1.19.9				1947,48	0; 1,00002	0	2	2,79278	
1.19.11				2065,26	0; 1,02(8)	0	2	2,65688	

1.20.1(2)				1744,70	1,003(17)	0	0		
1.20.3(4)				1850,23	1,010(12)	0	0		
1.20.5(6)		7·20=140	$2{,}31772\cdot10^{-3}$	1747,13	0	0	0	0	1,38988
1.20.9				1850,53	0; 1,003(17)	0	1		
1.20.11	H (990)			1962,46	0; 1,010(12)	0	1		
1.21.1(2)				1661,92		0	0		
1.21.3(4)				1762,44		0	0		
1.21.5(6)		7·21=147	$2{,}31164\cdot10^{-3}$	1664,24	То же	0	0	0	1,26149
1.21.9				1762,73		0	1		
1.21.11	η° (958)? !			1869,35		0	1		
1.22.1(2)				1586,58		0	0		
1.22.3(4)				1682,55		0	0		
1.22.5(6)		7·22=154	$2{,}30556\cdot10^{-3}$	1588,80	»	0	0	0	1,15006
1.22.9				1682,82		0	1		
1.22.11				1784,61		0	1		
1.23.1(2)				1517,72		0	0		
1.23.3(4)				1609,53		0	0		
1.23.5(6)		7·23=161	$2{,}29948\cdot10^{-3}$	1519,84	»	0	0	0	1,05273
1.23.9				1609,78		0	1		
1.23.11				1707,16		0	1		
1.24.1(2)				1454,52		0	0		
1.24.3(4)				1542,52		0	0		
1.24.5(6)		7·24=168	$2{,}29340\cdot10^{-3}$	1456,55	»	0	0	0	0,967212
1.24.9				1542,75		0	1		
1.24.11				1636,08		0	1		
1.25.1(2)				1396,31		0	0		
1.25.3(4)				1480,79		0	0		
1.25.5(6)		7·25=175	$2{,}28731\cdot10^{-3}$	1398,26	»	0	0	0	0,891654
1.25.9				1481,01		0	1		
1.25.11				1570,61		0	1		
1.26.1(2)				1342,51		0	0		
1.26.3(4)				1423,74		0	0		
1.26.5(6)		7·26=182	$2{,}28123\cdot10^{-3}$	1344,39	»	0	0	0	0,824564
1.26.9				1423,95		0	1		
1.26.11	ρ (770) ?			1510,10		0	1		

Таблица 9 (продолжение)

Обозначение в ПЗМ	Обозначение обычное	K	$1-\beta_1^2$	m	q	J_n	J_{max}	μ	q_1^2
1.27.1(2)				1292,64	1,003(17)	0	0		
1.27.3(4)				1370,85	1,010(12)	0	0		
1.27.5(6)		7·27=189	$2{,}27515\cdot10^{-3}$	1294,44	0	0	0	0	0,764718
1.27.9				1371,05	0; 1,003(17)	0	1		
1.27.11				1454,01	0; 1,010(12)	0	1		
1.28.1(2)				1246,27		0	0		
1.28.3(4)				1321,68		0	0		
1.28.5(6)		7·28=196	$2{,}26907\cdot10^{-3}$	1248,01	То же	0	0	0	0,711105
1.28.9				1321,87		0	1		
1.28.11				1401,85		0	1		
1.29.1(2)				1203,04		0	0		
1.29.3(4)				1275,84		0	0		
1.29.5(6)		7·29=203	$2{,}26299\cdot10^{-3}$	1204,72	»	0	0	0	0,662884
1.29.9				1276,02		0	1		
1.29.11				1353,23		0	1		
1.30.1(2)				1162,64		0	0		
1.30.3(4)				1233,00		0	0		
1.30.5(6)		7·30=210	$2{,}25690\cdot10^{-3}$	1164,26	»	0	0	0	0,619354
1.30.9				1233,16		0	1		
1.30.11				1307,79		0	1		
1.31.1(2)				1124,79		0	0		
1.31.3(4)				1192,87		0	0		
1.31.5(6)		7·31=217	$2{,}25082\cdot10^{-3}$	1126,36	»	0	0	0	0,579922
1.31.9				1193,02		0	1		
1.31.11				1265,23		0	1		
1.32.1(2)				1089,26		0	0		
1.32.3(4)				1155,19		0	0		
1.32.5(6)	η°	7·32=224	$2{,}24474\cdot10^{-3}$	1090,78	»	0	0	0	0,544088
1.32.9				1155,34		0	1		
1.32.11				1225,26		0	1		

1.33.1(2) 1.33.3(4) 1.33.5(6) 1.33.9 1.33.11	η°	7·33=231	$2{,}23866\cdot10^{-3}$	1055,84 1119,75 1057,32 1119,89 1187,67	»	0 0 0 0 0	0 0 0 1 1	0	0,511424
1.34.1(2) 1.34.3(4) 1.34.5(6) 1.34.9 1.34.11		7·34=238	$2{,}23258\cdot10^{-3}$	1024,34 1086,34 1025,77 1086,48 1152,24	»	0 0 0 0 0	0 0 0 1 1	0	0,481566
1.35.1(2) 1.35.3(4) 1.35.5(6) 1.35.9 1.35.11		7·35=245	$2{,}22650\cdot10^{-3}$	994,599 1054,81 995,987 1054,93 1118,79	»	0 0 0 0 0	0 0 0 1 1	0	0,454200
1.36.1(2) 1.36.3(4) 1.36.5(6) 1.36.9 1.36.11	$K^\pm$ K^0_S	7·36=252	$2{,}22042\cdot10^{-3}$	966,467 1024,97 967,816 1025,09 1087,15	1,006 0,996 0 0; 1,006 0; 0,996	0 0 0 0 0	0 0 0 1 1	0	0,429054
1.113.1(2) 1.113.3(4) 1.113.5(6) 1.113.9 1.113.11	$\pi^\pm$ π^0 ?	7·113=791	$1{,}75206\cdot10^{-3}$	273,733 290,112 276,601 276,601 290,337	0,899 0,951 0 0; 0,899 0; 0,951	0 0 0 0 0	0 0 0 1 1	0	$0{,}333147\cdot10^{-1}$
Второй ряд ПЗМ									
2.1.1(2) 2.1.3(4) 2.1.6 2.1.8 2.1.9(10)		113·1=113	$5{,}09483\cdot10^{-7}$	144755 153536 144756 153536 153536	(+)1,000000(10) $\mp$0,99994(43) 0 0 0; ±1	0,5 0,5 0,5 0,5 0	92,5 92,5 92,5 92,5 93	0,978(1,03) 0,972(1,03) $2{,}68\cdot10^{-2}$ $3{,}02\cdot10^{-2}$ 0,978(1,03)	$4{,}58545\cdot10^{7}$
2.2.1(2) 2.2.3(4) 2.2.6 2.2.8 2.2.9(10)		113·2=226	$5{,}09483\cdot10^{-7}$	72378,7 76769,1 72378,8 76769,2 76769,2	То же	0,5 0,5 0,5 0,5 0	46,5 46,5 46,5 46,5 47	0,978(1,03) 0,972(1,03) $2{,}68\cdot10^{-2}$ $3{,}02\cdot10^{-2}$ 0,978(1,03)	$1{,}14638\cdot10^{7}$

Таблица 9 (продолжение)

Обозначение в ПЗМ	Обозначение обычное	K	$1-\beta_1^2$	m	q	J_n	J_{max}	μ	q_1^2
2.3.1(2)				48253,2	(+)1,000000(10)	0,5	30,5	0,978(1,03)	
2.3.3(4)				51180,1	±0,99994(3)	0,5	30,5	0,972(1,03)	
2.3.6		113·3=339	$5{,}09483\cdot10^{-7}$	48253,2	0	0,5	30,5	$2{,}68\cdot10^{-2}$	$5{,}09508\cdot10^{6}$
2.3.8				51180,2	0	0,5	30,5	$3{,}02\cdot10^{-2}$	
2.3.9(10)				51180,2	0; ±1	0	31	0,978(1,03)	
2.4.1(2)				36190,4		0,5	22,5	0,978(1,03)	
2.4.3(4)				38385,6		0,5	22,5	0,972(1,03)	
2.4.6		113·4=452	То же	36190,4	То же	0,5	22,5	$2{,}68\cdot10^{-2}$	$2{,}86602\cdot10^{6}$
2.4.8				38385,7		0,5	22,5	$3{,}02\cdot10^{-2}$	
2.4.9(10)				38385,7		0	23	0,978(1,03)	
2.5.1(2)				28952,7		0,5	18,5	0,978(1,03)	
2.5.3(4)				30708,9		0,5	18,5	0,972(1,03)	
2.5.6		113·5=565	»	28952,7	»	0,5	18,5	$2{,}68\cdot10^{-2}$	$1{,}83428\cdot10^{6}$
2.5.8				30709,0		0,5	18,5	$3{,}02\cdot10^{-2}$	
2.5.9(10)				30709,0		0	19	0,978(1,03)	
2.6.1(2)				24127,6		0,5	16,5		
2.6.3(4)				25591,1		0,5	16,5		
2.6.6		113·6=678	»	24127,6	»	0,5	16,5	То же	$1{,}27382\cdot10^{6}$
2.6.8				25591,2		0,5	16,5		
2.6.9(10)				25591,2		0	17		
2.7.1(2)				20681,0		0,5	14,5		
2.7.3(4)				21935,0		0,5	14,5		
2.7.6		113·7=791	»	20681,1	»	0,5	14,5	»	$9{,}35881\cdot10^{5}$
2.7.8				21935,6		0,5	14,5		
2.7.9(10)				21935,6		0	15		
2.8.1(2)				18096,2		0,5	12,5		
2.8.3(4)				19193,9		0,5	12,5		
2.8.6		113·8=904	»	18096,2	»	0,5	12,5	»	$7{,}16543\cdot10^{5}$
2.8.8				19193,9		0,5	12,5		
2.8.9(10)				19193,9		0	13		

2.9.1(2) 2.9.3(4) 2.9.6 2.9.8 2.9.9(10)		113·9=1017	$5{,}09482\cdot10^{-7}$	16085,7 17061,4 16085,7 17061,5 17061,5	»	0,5 0,5 0,5 0,5 0	10,5 10,5 10,5 10,5 11	»	$5{,}66165\cdot10^{5}$
2.10.1(2) 2.10.3(4) 2.10.6 2.10.8 2.10.9(10)		113·10=1130	То же	14477,3 15355,5 14477,4 15335,5 15355,5	»	0,5 0,5 0,5 0,5 0	9,5 9,5 9,5 9,5 10	»	$4{,}58600\cdot10^{5}$
2.11.1(2) 2.11.3(4) 2.11.6 2.11.8 2.11.9(10)		113·11=1243	»	13161,4 13959,7 13161,4 13959,8 13959,8	»	0,5 0,5 0,5 0,5 0	8,5 8,5 8,5 8,5 9	»	$3{,}79013\cdot10^{5}$
2.12.1(2) 2.12.3(4) 2.12.6 2.12.8 2.12.9(10)		113·12=1356	»	12064,8 12796,6 12064,8 12796,6 12796,6	»	0,5 0,5 0,5 0,5 0	8,5 8,5 8,5 8,5 9	»	$3{,}18481\cdot10^{5}$
2.13.1(2) 2.13.3(4) 2.13.6 2.13.8 2.13.9(10)		113·13=1469	»	11136,9 11812,4 11136,9 11812,4 11812,4	»	0,5 0,5 0,5 0,5 0	7,5 7,5 7,5 7,5 8	»	$2{,}71372\cdot10^{5}$
2.14.1(2) 2.14.3(4) 2.14.6 2.14.8 2.14.9(10)		113·14=1582	»	10341,5 10968,8 10341,6 10968,9 10968,8	»	0,5 0,5 0,5 0,5 0	7,5 7,5 7,5 7,5 8	»	$2{,}33992\cdot10^{5}$
2.15.1(2) 2.15.3(4) 2.15.6 2.15.8 2.15.9(10)		113·15=1695	»	9652,22 10237,7 9652,25 10237,7 10237,7	»	0,5 0,5 0,5 0,5 0	6,5 6,5 6,5 6,5 7	»	$2{,}03836\cdot10^{5}$

Таблица 9 (продолжение)

Обозначение в ПЗМ	Обозначение обычное	K	$1-\beta_1^2$	m	q	J_n	J_{max}	μ	q_1^2
2.16.1(2)				9049,08	1,000000(10)	0,5	6,5	0,978(1,03)	
2.16.3(4)				9597,98	0,99994(3)	0,5	6,5	0,972(1,03)	
2.16.6		113·16=1808	$5{,}09482\cdot10^{-7}$	9049,11	0	0,5	6,5	$2{,}68\cdot10^{-2}$	$1{,}79155\cdot10^{5}$
2.16.8				9598,02	0	0,5	6,5	$3{,}02\cdot10^{-2}$	
2.16.9(10)				9598,00	0; ±1	0	7	0,978(1,03)	
2.17.1(2)				8516,90		0,5	5,5		
2.17.3(4)				9033,52		0,5	5,5		
2.17.6	Ψ' (3695)	113·17=1921	То же	8516,93	То же	0,5	5,5	То же	$1{,}58700\cdot10^{5}$
2.17.8				9033,56		0,5	5,5		
2.17.9(10)				9033,53		0	6		
2.18.1(2)				8043,84		0,5	5,5		
2.18.3(4)				8531,77		0,5	5,5		
2.18.6		113·18=2034	»	8043,88	»	0,5	5,5	»	$1{,}41558\cdot10^{5}$
2.18.8				8531,81		0,5	5,5		
2.18.9(10)				8531,78		0	6		
2.19.1(2)				7620,59		0,5	5,5		
2.19.3(4)				8082,84		0,5	5,5		
2.19.6		113·19=2147	»	7620,62	»	0,5	5,5	»	$1{,}27051\cdot10^{5}$
2.19.8				8082,88		0,5	5,5		
2.19.9(10)				8082,85		0	6		
2.20.1(2)	N (3690)			7239,66		0,5	5,5		
2.20.3(4)				7678,80		0,5	5,5		
2.20.6		113·20=2260	»	7239,69	»	0,5	5,5	»	$1{,}14665\cdot10^{5}$
2.20.8	ψ (3695)			7678,84		0,5	5,5		
2.20.9(10)				7678,82		0	6		
2.21.1(2)				6895,01		0,5	4,5	0,978(1,03)	
2.21.3(4)	N (3755)			7313,25		0,5	4,5	0,972(1,03)	
2.21.6		113·21=2373	»	6895,04	»	0,5	4,5	$2{,}69\cdot10^{-2}$	$1{,}04006\cdot10^{5}$
2.21.8				7313,29		0,5	4,5	$3{,}02\cdot10^{-2}$	
2.21.9(10)				7313,26		0	5	0,978(1,03)	

2.22.1(2) 2.22.3(4) 2.22.6 2.22.8 2.22.9(10)	X (2500)	113·22=2486	»	581,69 6980,92 6581,72 6980,96 6980,93	»	0,5 0,5 0,5 0,5 0	4,5 4,5 4,5 4,5 5	То же	$9{,}47672\cdot10^4$
2.23.1(2) 2.23.3(4) 2.23.6 2.23.8 2.23.9(10)	N (3245)	113·23=2599	»	6295,61 6677,50 6295,65 6677,53 6677,51	»	0,5 0,5 0,5 0,5 0	4,5 4,5 4,5 4,5 5	»	$8{,}67069\cdot10^4$
2.24.1(2) 2.24.3(4) 2.24.6 2.24.8 2.24.9(10)	N (3030) Δ (3230) ψ (3105)	113·24=2712	»	6033,38 6399,35 6033,42 6399,39 6399,36	»	0,5 0,5 0,5 0,5 0	4,5 4,5 4,5 4,5 5	»	$7{,}96329\cdot10^4$
2.25.1(2) 2.25.3(4) 2.25.6 2.25.8 2.25.9(10)	Σ (3000)	113·25=2825	»	5792,12 6143,46 5792,16 6143,50 6143,47	»	0,5 0,5 0,5 0,5 0	4,5 4,5 4,5 4,5 5	»	$7{,}33906\cdot10^4$
2.26.1(2) 2.26.3(4) 2.26.6 2.26.8 2.26.9(10)	Δ (2850)	113·26=2938	»	5569,42 5907,26 5569,46 5907,30 5907,27	»	0,5 0,5 0,5 0,5 0	4,5 4,5 4,5 4,5 5	»	$6{,}78547\cdot10^4$
2.27.1(2) 2.27.3(4) 2.27.6 2.27.8 2.27.9(10)		113·27=3051	$5{,}09481\cdot10^{-7}$	5363,22 5688,55 5363,26 5688,59 5688,56	»	0,5 0,5 0,5 0,5 0	3,5 3,5 3,5 3,5 4	»	$6{,}29223\cdot10^4$
2.28.1(2) 2.28.3(4) 2.28.6 2.28.8 2.28.9(10)	N (2650) K^* (2800)	113·28=3164	То же	5171,75 5485,46 5171,79 5485,50 5485,47	»	0,5 0,5 0,5 0,5 0	3,5 3,5 3,5 3,5 4	»	$5{,}85089\cdot10^4$

Таблица 9 (продолжение)

Обозначение в ПЗМ	Обозначение обычное	K	$1-\beta_1^2$	m	q	J_n	J_{max}	μ	q_1^2
2.29.1(2)	Σ (2620)			4993,48	1,000000(10)	0,5	3,5	0,978(1,03)	
2.29.3(4)				5296,38	0,99994(3)	0,5	3,5	0,972(1,03)	
2.29.6	Λ (2585)	113·29=3277	$5{,}09481\cdot10^{-7}$	4993,52	0	0,5	3,5	$2{,}69\cdot10^{-2}$	$5{,}45441\cdot10^{4}$
2.29.8				5296,42	0	0,5	3,5	$3{,}02\cdot10^{-2}$	
2.29.9(10)				5296,39	0; ±1	0	4	0,978(1,03)	
2.30.1(2)	Σ (2455)			4827,10		0,5	3,5		
2.30.3(4)				5119,90		0,5	3,5		
2.30.6		113·30=3390	То же	4827,14	То же	0,5	3,5	То же	$5{,}09691\cdot10^{4}$
2.30.8				5119,94		0,5	3,5		
2.30.9(10)				5119,91		0	4		
2.31.1(2)	N (2220)			4671,45		0,5	3,5		
2.31.3(4)	Z 1(2500)			4954,81		0,5	3,5		
2.31.6	Λ (2350)	113·31=3503	»	4671,49	»	0,5	3,5	»	$4{,}77344\cdot10^{4}$
2.31.8				4954,85		0,5	3,5		
2.31.9(10)				4954,82		0	4		
2.32.1(2)				4525,53		0,5	3,5		
2.32.3(4)	Ξ (2500)			4800,04		0,5	3,5		
2.32.6		113·32=3616	»	4525,56	»	0,5	3,5	»	$4{,}47982\cdot10^{4}$
2.32.8				4800,08		0,5	3,5		
2.32.9(10)				4800,05		0	4		
2.33.1(2)	Σ (2250)			4388,45		0,5	3,5		
2.33.3(4)	Δ (2420) ?			4654,65		0,5	3,5		
2.33.6		113·33=3729	»	4388,49	»	0,5	3,5	»	$4{,}21249\cdot10^{4}$
2.33.8				4654,69		0,0	3,5		
2.33.9(10)	$N\overline{N}$ (2375)			4654,66		0	4		
2.34.1(2)	N (2190)			4259,44		0,5	3,5		
2.34.3(4)				4517,81		0,5	3,5		
2.34.6		113·34=3842	»	4259,47	»	0,5	3,5	»	$3{,}96839\cdot10^{4}$
2.34.8				4517,85		0,5	3,5		
2.34.9(10)	U (2260)			4517,82		0	4		

2.35.1(2)	Σ (2100)			4137,80		3	0,5		
2.35.3(4)	Ξ (2250)			4388,79		3	0,5		
2.35.6	Λ (2100)	113·35=3955	»	4137,83	»	3	0,5	»	$3{,}74492\cdot10^4$
2.35.8				4388,83		3	0,5		
2.35.9(10)	ρ (2275)			4388,80		4	0		
2.36.1(2)	Σ (2030)			4022,91		3	3,5		
2.36.3(4)	Δ (2160)			4266,94		3	3,5		
2.36.6	Λ (2020)	113·36=4068	»	4022,95	»	3	3,5	»	$3{,}53980\cdot10^4$
2.36.8				4266,97		3	3,5		
2.36.9(10)	T (2200)			4266,94		4	4		
2.37.1(2)	N (2000)			3914,24		0,5	2,5		
2.37.3(4)				4151,67		0,5	2,5		
2.37.6	Λ (2010)	113·37=4181	»	3914,28	»	0,5	2,5	»	$3{,}35109\cdot10^4$
2.37.8				4151,71		0,5	2,5		
2.37.9(10)	ρ (2100)			4151,68		0	3		
2.38.1(2)	Δ (1950)			3811,28		0,5	2,5		
2.38.3(4)	Σ (2080)			4042,47		0,5	2,5		
2.38.6	Λ (1870)	113·38=4294	»	3811,32	»	0,5	2,5	»	$3{,}17708\cdot10^4$
2.38.8				4042,51		0,5	2,5		
2.38.9(10)				4042,48		0	3		
2.39.1(2)	Σ (1915)			3713,61		0,5	2,5		
2.39.3(4)	Ξ (2030)			3938,87		0,5	2,5		
2.39.6	Λ (1860)	113·39=4407	»	3713,65	»	0,5	2,5	»	$3{,}01628\cdot10^4$
2.39.8				3938,91		0,5	2,5		
2.39.9(10)				3938,88		0	3		
2.40.1(2)	Σ (1880)			3620,82		0,5	2,5		
2.40.3(4)	Ξ (1940)			3840,45		0,5	2,5		
2.40.6	Λ (1830)	113·40=4520	»	3620,86	»	0,5	2,5	»	$2{,}86739\cdot10^4$
2.40.8				3840,49		0,5	2,5		
2.40.9(10)	A_4 (1960)			3840,46		0	3		
2.41.1(2)	N (1810)			3532,56		0,5	2,5		
2.41.3(4)	$Z1$ (1900)			3746,83		0,5	2,5		
2.41.6	Λ (1815)	113·41=4633	$5{,}09480\cdot10^{-7}$	3532,59	»	0,5	2,5	»	$2{,}72926\cdot10^4$
2.41.8				3746,87		0,5	2,5		
2.41.9(10)	S (1930)			3746,84		0	3		

Таблица 9 (продолжение)

Обозначение в ПЗМ	Обозначение обычное	K	$1-\beta_1^2$	m	q	J_n	J_{max}	μ	q_1^2
2.42.1(2)	Σ(1750)	113·42=4746	$5{,}09480\cdot10^{-7}$	3448,49	1,000000(10)	0,5	2,5	0,978(1,03)	$2{,}60088\cdot10^4$
2.42.3(4)	Δ (1890)			3657,67	0,99994(3)	0,5	2,5	0,972(1,03)	
2.42.6	Λ (1750)			3448,53	0	0,5	2,5	$2{,}69\cdot10^{-2}$	
2.42.8				3657,71	0	0,5	2,5	$3{,}02\cdot10^{-2}$	
2.42.9(10)				3657,68	0; ±5	0	3	0,978(1,03)	
2.43.1(2)	N (1688)	113·43=4859	То же	3368,34		0,5	2,5		$2{,}48135\cdot10^4$
2.43.3(4)	Δ (1910)			3572,66		0,5	2,5		
2.43.6	Λ (1690) ?			3368,38	То же	0,5	2,5	То же	
2.43.8				3572,70		0,5	2,5		
2.43.9(10)				3572,67		0	3		
2.44.1(2)	Σ (1670), N (1670)	113·44=4972	»	3291,84		0,5	2,5		$2{,}36987\cdot10^4$
2.44.3(4)	Z0 (1780)			3491,51		0,5	2,5		
2.44.6	Λ (1670)			3291,87	»	0,5	2,5	»	
2.44.8				3491,55		0,5	2,5		
2.44.9(10)	$L^{\pm}$ (1770) ?			3491,52		0	3		—
2.45.1(2)	N (1700)	113·45=5085	»	3218,73		0,5	2,5		$2{,}26574\cdot10^4$
2.45.3(4)	Ξ (1820) ?			3413,97		0,5	2,5		
2.45.6				3218,76	»	0,5	2,5	»	
2.45.8				3414,01		0,5	2,5		
2.45.9(10)	$L^{\pm}$ (1770) ?			3413,98		0	3		
2.46.1(2)	N (1535)	113·46=5198	»	3148,80		0,5	2,5		$2{,}16833\cdot10^4$
2.46.3(4)	Δ (1670)			3339,80		0,5	2,5		
2.46.6				3148,83	»	0,5	2,5	»	
2.46.8				3339,84		0,5	2,5		
2.46.9(10)	g (1680)			3339,80		0	3		
2.47.1(2)	N (1520)	113·47=5311	»	3081,84		0,5	2,5		$2{,}07707\cdot10^4$
2.47.3(4)	Ω^-,Σ' (1670)			3268,78		0,5	2,5		
2.47.6				3081,88	»	0,5	2,5	»	
2.47.8				3268,82		0,5	2,5		
2.47.9(10)	K_N (1660) ?			3268,79		0	3		
	ω (1675) ?								

2.48.1(2)	Ξ^-(1530)			3017,68		0,5	2,5		
2.48.3(4)	Ξ (1630)			3200,73		0,5	2,5		
2.48.6	Λ' (1520)	113·48=5424	»	3017,72	»	0,5	2,5	»	$1{,}99146\cdot10^4$
2.48.8				3200,77		0,5	2,5		
2.48.9(10)	A_3 (1640)			3200,73		0	3		
	K_N(1660)								
2.49.1(2)	Ξ^- (1530)			2956,14		0,5	2,5		
2.49.3(4)	Δ (1650)			3135,45		0,5	2,5		
2.49.6	Λ' (1520)	113·49=5537	»	2956,17	»	0,5	2,5	»	$1{,}91103\cdot10^4$
2.49.8				3135,49		0,5	2,5		
2.49.9(10)	ρ' (1600)			3135,46		0	3		
2.50.1(2)	Σ (1480)			2897,05		0,5	2,5		
2.50.3(4)				3072,78		0,5	2,5		
2.50.6		113·50=5650	»	2897,09	»	0,5	2,5	»	$1{,}83538\cdot10^4$
2.50.8				3072,82		0,5	2,5		
2.50.9(10)	F_1 (1540)			3072,79		0	3		
2.51.1(2)	Σ (1440)			2840,29		0,5	2,5		
2.51.3(4)				3012,57		0,5	2,5		
2.51.6		113·51=5763	»	2840,32	»	0,5	2,5	»	$1{,}76413\cdot10^4$
2.51.8	Ξ^0 (1530)			3012,61		0,5	2,5		
2.51.9(10)				3012,58		0	3		
2.52.1(2)	N (1470)			2785,70		0,5	2,5		
2.52.3(4)				2954,68		0,5	2,5		
2.52.6		113·52=5876	»	2785,74	»	0,5	2,5	»	$1{,}69695\cdot10^4$
2.52.8	Ξ^0 (1530)			2954,72		0,5	2,5		
2.52.9(10)	f' (1514)			2954,68		0	3		
2.53.1(2)	Σ (1385)			2733,18		0,5	2,5		
2.53.3(4)				2898,97		0,5	2,5		
2.53.6	Λ' (1405)	113·53=5989	»	2733,22	»	0,5	2,5	»	$1{,}63354\cdot10^4$
2.53.8				2899,01		0,5	2,5		
2.53.9(10)				2898,98		0	3		
2.54.1(2)				2682,60		0,5	2,5		
2.54.3(4)				2845,32		0,5	2,5		
2.54.6		113·54=6102	»	2682,64	»	0,5	2,5	»	$1{,}57362\cdot10^4$
2.54.8				2845,36		0,5	2,5		
2.54.9(10)	X (1440) ?			2845,33		0	3		

Таблица 9 (продолжение)

Обозначение в ПЗМ	Обозначение обычное	K	$1-\beta_1^2$	m	q	J_n	J_{max}	μ	q_1^2
2.55.1(2)				2633,86	1,000000(10)	0,5	2,5	0,978(1,03)	
2.55.3(4)				2793,63	0,99994(3)	0,5	2,5	0,972(1,03)	
2.55.6	Λ (1330)	113·55=6215	$5{,}09480\cdot10^{-7}$	2633,90	0	0,5	2,5	$2{,}69\cdot10^{-2}$	$1{,}51694\cdot10^4$
2.55.8				2793,67	0	0,5	2,5	$3{,}02\cdot10^{-2}$	
2.55.9(10)	X (1430)			2793,64	0; ±1	0	3	0,978(1,03)	
2.56.1(2)	Ξ^-			2586,87		0,5	2,5		
2.56.3(4)				2743,78		0,5	2,5		
2.56.6	Ξ^0	113·56=6328	То же	2586,90	То же	0,5	2,5	То же	$1{,}46327\cdot10^4$
2.56.8				2743,82		0,5	2,5		
2.56.9(10)	E (1420)			2743,79		0	3		
2.57.1(2)				2541,52		0,5	2,5		
2.57.3(4)				2695,68		0,5	2,5		
2.57.6		113·57=6441	»	2541,55	»	0,5	2,5	»	$1{,}41239\cdot10^4$
2.57.8				2695,72		0,5	2,5		
2.57.9(10)				2695,69		0	3		
2.58.1(2)				2497,73		0,5	2,5		
2.58.3(4)				2649,24		0,5	2,5		
2.58.6		113·58=6554	»	2497,77	»	0,5	2,5	»	$1{,}36413\cdot10^4$
2.58.8				2649,28		0,5	2,5		
2.58.9(10)				2649,24		0	3		
2.59.1(2)				2455,43		0,5	2,5		
2.59.3(4)				2604,37		0,5	2,5		
2.59.6		113·59=6667	$5{,}09479\cdot10^{-7}$	2455,47	»	0,5	2,5	»	$1{,}31830\cdot10^4$
2.59.8				2604,41		0,5	2,5		
2.59.9(10)	K_A(1280)			2604,38		0	3		
2.60.1(2)	Δ (1232)			2414,54		0,5	2,5		
2.60.3(4)				2561,00		0,5	2,5		
2.60.6		113·60=6780	То же	2414,58	»	0,5	2,5	»	$1{,}27474\cdot10^4$
2.60.8				2561,04		0,5	2,5		
2.60.9(10)	A_2 (1310)			2561,01		0	3		

2.61.1(2)				2374,99		0,5	2,5		
2.61.3(4)				2519,05		0,5	2,5		
2.61.6		113·61=6893	»	2375,03	»	0,5	2,5	»	$1{,}23330\cdot10^4$
2.61.8				2519,09		0,5	2,5		
2.61.9(10)	D^0 (1285)			2519,06		0	3		
2.62.1(1)	Σ^-			2336,72		0,5	1,5		
2.62.3(4)				2478,46		0,5	1,5		
2.62.6	Σ^0	113·62=7006	»	2336,75	»	0,5	1,5	»	$1{,}19385\cdot10^4$
2.62.8				2478,50		0,5	1,5		
2.62.9(10)	f^0 (1270)			2478,46		0	2		
2.63.1(2)				2299,66		0,5	1,5		
2.63.3(4)				2439,15		0,5	1,5		
2.63.6		113·63=7119	»	2299,6,	»	0,5	1,5	»	$1{,}15627\cdot10^4$
2.63.8				2439,19		0,5	1,5		
2.63.9(10)	K_A (1240) ρ' (1250)			2439,16		0	2		
2.64.1(2)				2263,76		0,5	1,5		
2.64.3(4)				2401,07		0,5	1,5		
2.64.6		113·64=7232	»	2263,79	»	0,5	1,5	»	$1{,}12043\cdot10^4$
2.64.8				2401,11		0,5	1,5		
2.64.9(10)	B (1235)			2401,08		0	2		
2.65.1(2)				2228,96		0,5	1,5		
2.65.3(4)				2364,16		0,5	1,5		
2.65.6		113·65=7345	»	2229,00	»	0,5	1,5	»	$1{,}08624\cdot10^4$
2.65.8				2364,20		0,5	1,5		
2.65.9(10)				2364,17		0	2		
2.66.1(2)				2195,22		0,5	1,5		
2.66.3(4)	Σ^+			2328,37		0,5	1,5		
2.66.6	Λ^0	113·66=7458	»	2195,25	»	0,5	1,5	»	$1{,}05358\cdot10^4$
2.66.8				2328,41		0,5	1,5		
2.66.9(10)				2328,38		0	2		
2.67.1(2)				2162,48		0,5	1,5		
2.67.3(4)				2293,65		0,5	1,5		
2.67.6	Λ^0	113·67=7571	»	2162,52	»	0,5	1,5	»	$1{,}02238\cdot10^4$
2.67.8				2293,69		0,5	1,5		
2.67.9(10)	$A_{1.5}$ (1170)			2293,66		0	2		

Таблица 9 (продолжение)

Обозначение в ПЗМ	Обозначение обычное	K	$1-\beta_1^2$	m	q	J_n	J_{max}	μ	q_1^2
2.68.1(2)				2130,71	1,000000(10)	0,5	1,5	0,978(1,03)	
2.68.3(4)				2259,95	0,99994(3)	0,5	1,5	0,972(1,03)	
2.68.6		113·68=7684	$5\cdot09479\cdot10^{-7}$	2130,75	0	0,5	1,5	$2{,}69\cdot10^{-2}$	$9{,}92547\cdot10^3$
2.68.8				2259,99	0	0,5	1,5	$3{,}02\cdot10^{-2}$	
2.68.9(10)	M (1150)			2259,96	0; ±1	0	2	0,978(1,03)	
2.69.1(2)				2099,86		0,5	1,5		
2.69.3(4)				2227,23		0,5	1,5		
2.69.6		113·69=7797	То же	2099,90	То же	0,5	1,5	То же	$9{,}63999\cdot10^3$
2.69.8				2227,27		0,5	1,5		
2.69.9(10)				2227,24		0	2		
2.70.1(2)				2069,89		0,5	1,5		
2.70.3(4)				2195,44		0,5	1,5		
2.70.6		113·70=7910	»	2069,92	»	0,5	1,5	»	$9{,}36665\cdot10^3$
2.70.8				2195,48		0,5	1,5		
2.70.9(10)				2195,47		0	2		
2.71.1(2)				2040,76		0,5	1,5		
2.71.3(4)				2164,55		0,5	1,5		
2.71.6		113·71=8023	»	2040,80	»	0,5	1,5	»	$9{,}10478\cdot10^3$
2.71.8				2164,59		0,5	1,5		
2.71.9(10)	A_1 (1100)			2164,56		0	2		
2.72.1(2)				2012,45		0,5	1,5		
2.72.3(4)				2134,52		0,5	1,5		
2.72.6		113·72=8136	»	2012,48	»	0,5	1,5	»	$8{,}85374\cdot10^3$
2.72.8				2134,56		0,5	1,5		
2.72.9(10)	η_N (1080)			2134,52		0	2		
2.73.1(2)				1984,91		0,5	1,5		
2.73.3(4)				2105,31		0,5	1,5		
2.73.6		113·73=8249	»	1984,94	»	0,5	1,5	»	$8{,}61295\cdot10^3$
2.73.8				2105,35		0,5	1,5		
2.73.9(10)				2105,31		0	2		

2.74.1(2) 2.74.3(4) 2.74.6 2.74.8 2.74.9(10)		113·74=8362	»	1958,11 2076,88 1958,15 2076,92 2076,89	»	0,5 0,5 0,5 0,5 0	1,5 1,5 1,5 1,5 2	»	$8{,}38185\cdot10^3$
2.75.1(2) 2.75.3(4) 2.75.6 2.75.8 2.75.9(10)	B_1 (1040)	113·75=8475	$5{,}09478\cdot10^{-7}$	1932,03 2049,22 1932,06 2049,26 2049,23	»	0,5 0,5 0,5 0,5 0	1,5 1,5 1,5 1,5 2	»	$8{,}15994\cdot10^3$
2.76.1(2) 2.76.3(4) 2.76.6 2.76.8 2.76.9(10)	M (1033)	113·76=8588	То же	1906,63 2022,29 1906,67 2022,32 2022,29	»	0,5 0,5 0,5 0,5 0	1,5 1,5 1,5 1,5 2	»	$7{,}94672\cdot10^3$
2.77.1(2) 2.77.3(4) 2.77.6 2.77.8 2.77.9(10)	Φ^9 (1019)	113·77=8701	»	1881,90 1996,05 1881,93 1996,09 1996,05	»	0,5 0,5 0,5 0,5 0	1,5 1,5 1,5 1,5 2	»	$7{,}74175\cdot10^3$
2.78.1(2) 2.78.3(4) 2.78.6 2.78.8 2.78.9(10)		113·78=8814	»	1857,80 1970,49 1857,83 1970,52 1970,49	»	0,5 0,5 0,5 0,5 0	1,5 1,5 1,5 1,5 2	»	$7{,}54462\cdot10^3$
2.79.1(2) 2.79.3(4) 2.79.6 2.79.8 2.79.9(10)	S^* (993)	113·79=8927	»	1834,30 1945,57 1834,34 1945,61 1945,57	»	0,5 0,5 0,5 0,5 0	1,5 1,5 1,5 1,5 2	»	$7{,}35492\cdot10^3$
2.80.1(2) 2.80.3(4) 2.80.6 2.80.8 2.80.9(10)	δ (970)	113·80=9040	»	1811,40 1921,28 1811,44 1921,32 1921,28	»	0,5 0,5 0,5 0,5 0	1,5 1,5 1,5 1,5 2	»	$7{,}17229\cdot10^3$

Таблица 9 (продолжение)

Обозначение в ПЗМ	Обозначение обычное	K	$1-\beta_1^2$	m	q	J_n	J_{max}	μ	q_1^2
2.81.1(2)				1789,06	1,000000(10)	0,5	1,5	0,978(1,03)	
2.81.3(4)				1897,58	0,99994(3)	0,5	1,5	0,972(1,03)	
2.81.6		113·81=9153	$5{,}09478\cdot10^{-7}$	1789,10	0	0,5	1,5	$2{,}69\cdot10^{-2}$	$6{,}99639\cdot10^{3}$
2.81.8				1897,62	0	0,5	1,5	$3{,}02\cdot10^{-2}$	
2.81.9(10)				1897,59	$0;\pm1$	0	2	0,978(1,03)	
2.82.1(2)				1767,27		0,5	1,5		
2.82.3(4)				1874,47		0,5	1,5		
2.82.6		113·82=9266	То же	1767,30	То же	0,5	1,5	То же	$6{,}82683\cdot10^{3}$
2.82.8				1874,51		0,5	1,5		
2.82.9(10)	η' (958) ?			1874,47		0	2		
2.83.1(2)				1746,00		0,5	1,5		
2.83.3(4)				1851,91		0,5	1,5		
2.83.6		113·83=9379	»	1746,04	»	0,5	1,5	»	$6{,}66345\cdot10^{3}$
2.83.8				1851,95		0,5	1,5		
2.83.9(10)	M (953) ?			1851,91		0	2		
2.84.1(2)				1725,24		0,5	1,5		
2.84.3(4)				1829,89		0,5	1,5		
2.84.6		113·84=9492	»	1725,27	»	0,5	1,5	»	$6{,}50583\cdot10^{3}$
2.84.8				1829,93		0,5	1,5		
2.84.9(10)	M (940) ?			1829,89		0	2		
2.85.1(2)				1704,96		0,5	1,5		
2.85.3(4)				1808,38		0,5	1,5		
2·85.6		113·85=9605	»	1705,00	»	0,5	1,5	»	$6{,}35374\cdot10^{3}$
2.85.8				1808,42		0,5	1,5		
2.85.9(10)				1808,39		0	2		
2.86.1(2)				1685,16		0,5	1,5		
2.86.3(4)				1787,38		0,5	1,5		
2.86.6		113·86=9718	»	1685,20	»	0,5	1,5	»	$6{,}20692\cdot10^{3}$
2.86.8				1787,42		0,5	1,5		
2.86.9(10)				1787,38		0	2		

2.87.1(2) 2.87.3(4) 2.87.6 2.87.8 2.87.9(10)		113·87=9831	»	1665,82 1766,86 1665,85 1766,90 1766,86	»	0,5 0,5 0,5 0,5 0	1,5 1,5 1,5 1,5 2	»	$6,06513 \cdot 10^3$
2.88.1(2) 2.88.3(4) 2.88.6 2.88.8 2.88.9(10)	K^* (892)	113·88=9944	»	1646,91 1746,81 1646,94 1746,84 1746,81	»	0,5 0,5 0,5 0,5 0	1,5 1,5 1,5 1,5 2	»	$5,92815 \cdot 10^3$
2.89.1(2) 2.89.3(4) 2.89.6 2.89.8 2.89.9(10)		113·89=10057	»	1628,43 1727,20 1628,46 1727,24 1727,21	»	0,5 0,5 0,5 0,5 0	1,5 1,5 1,5 1,5 2	»	$5,79576 \cdot 10^3$
2.90.1(2) 2.90.3(4) 2.90.6 2.90.8 2.90.9(10)		113·90=10170	»	1610,35 1708,04 1610,39 1708,07 1708,07	»	0,5 0,5 0,5 0,5 0	1,5 1,5 1,5 1,5 2	»	$5,66775 \cdot 10^3$
2.91.1(2) 2.91.3(4) 2.91.6 2.91.8 2.91.9(10)		113·91=10283	$5,09477 \cdot 10^{-7}$	1592,68 1689,29 1592,72 1689,33 1689,29	»	0,5 0,5 0,5 0,5 0	1,5 1,5 1,5 1,5 2	»	$5,54394 \cdot 10^3$
2.92.1(2) 2.92.3(4) 2.92.6 2.92.8 2.92.9(10)		113·92=10396	То же	1575,39 1670,95 1575,43 1670,99 1670,95	»	0,5 0,5 0,5 0,5 0	1,5 1,5 1,5 1,5 2	»	$5,42415 \cdot 10^3$
2.93.1(2) 2.93.3(4) 2.93.6 2.93.8 2.93.9(10)		113·93=10509	»	1558,47 1653,00 1558,51 1653,04 1653,01	»	0,5 0,5 0,5 0,5 0	1,5 1,5 1,5 1,5 2	»	$5,30820 \cdot 10^3$

Таблица 9 (продолжение)

Обозначение в ПЗМ	Обозначение обычное	K	$1-\beta_1^2$	m	q	J_n	J_{max}	μ	q_1^2
2.94.1(2)				1541,91	1,000000(10)	0,5	1,5	0,978(1,03)	
2.94.3(4)				1635,44	0,99994(3)	0,5	1,5	0,972(1,03)	
2.94.6		113·94=10622	$5{,}09477\cdot10^{-7}$	1541,95	0	0,5	1,5	$2{,}69\cdot10^{-2}$	$5{,}19593\cdot10^{3}$
2.94.8				1635,48	0	0,5	1,5	$3{,}02\cdot10^{-2}$	
2.94.9(10)				1635,45	$0;\pm1$	0	2	0,978(1,03)	
2.95.1(2)				1525,70		0,5	1,5		
2.95.3(4)				1618,25		0,5	1,5		
2.95.6		113·95=10735	То же	1525,74	То же	0,5	1,5	То же	$5{,}08718\cdot10^{3}$
2.95.8				1618,29		0,5	1,5		
2.95.9(10)				1618,25		0	2		
2.96.1(2)				1509,83		0,5	1,5	0,978(1,03)	
2.96.3(4)				1601,41		0,5	1,5	0,971(1,03)	
2.96.6		113·96=10848	»	1509,87	»	0,5	1,5	$2{,}69\cdot10^{-2}$	$4{,}98182\cdot10^{3}$
2.96.8				1601,45		0,5	1,5	$3{,}02\cdot10^{-2}$	
2.96.9(10)				1601,42		0	2	0,978(1,03)	
2.97.1(2)				1494,29		0,5	1,5		
2.97.3(4)				1584,93		0,5	1,5		
2.97.6		113·97=10961	»	1494,32	»	0,5	1,5	То же	$4{,}87970\cdot10^{3}$
2.97.8				1584,96		0,5	1,5		
2.97.9(10)				1584,93		0	2		
2.98.1(2)				1482,78		0,5	0,5		
2.98.3(4)				1572,36		0,5	0,5		
2.98.6		113·98=11074	»	1484,85	»	0,5	0,5	»	$4{,}78068\cdot10^{3}$
2.98.8				1574,19		0,5	0,5		
2.98.9(10)				1572,73		0	1		
2.99.1(2)				1467,82		0,5	0,5		
2.99.3(4)				1556,50		0,5	0,5		
2.99.6		113·99=11187	»	1469,87	»	0,5	0,5	»	$4{,}68465\cdot10^{3}$
2.99.8				1558,31		0,5	0,5		
2.99.9(10)				1556,86		0	1		

2.100.1(2)				1453,16		0,5	0,5		
2.100.3(4)				1540,96		0,5	0,5		
2.100.6		113·100=11300	»	1455,19	»	0,5	0,5	»	$4{,}59149\cdot10^3$
2.100.8				1542,75		0,5	0,5		
2.100.9(10)				1541,31		0	1		
2.101.1(2)				1438,80		0,5	0,5		
2.101.3(4)				1525,72		0,5	0,5		
2.101.6		113·101=11413	»	1440,80	»	0,5	0,5	»	$4{,}50108\cdot10^3$
2.101.8				1527,50		0,5	0,5		
2.101.9(10)	ω^0 (783)			1526,07		0	1		
2.102.1(2)				1424,71		0,5	0,5		
2.102.3(4)				1510,78		0,5	0,5		
2.102.6		113·102=11526	»	1426,70	»	0,5	0,5	»	$4{,}41331\cdot10^3$
2.102.8				1512,54		0,5	0,5		
2.102.9(10)	ρ (770)			1511,13		0	1		
2.103.1(2)				1410,90		0,5	0,5		
2.103.3(4)				1496,13		0,5	0,5		
2.103.6		113·103=11639	»	1412,86	»	0,5	0,5	»	$4{,}32809\cdot10^3$
2.103.8				1497,87		0,5	0,5		
2.103.9(10)				1496,48		0	1		
2.104.1(2)				1397,35		0,5	0,5		
2.104.3(4)				1481,77		0,5	0,5		
2.104.6		113·104=11752	«	1399,30	»	0,5	0,5	»	$4{,}24531\cdot10^3$
2.104.8				1483,49		0,5	0,5		
2.104.9(10)				1482,11		0	1		
2.105.1(2)				1384,06		0,5	0,5		
2.105.3(4)				1467,67		0,5	0,5		
2.105.6		113·105=11865	»	1385,99	»	0,5	0,5	»	$4{,}16489\cdot10^3$
2.105.8				1469,38		0,5	0,5		
2.105.9(10)				1468,01		0	1		
2.106.1(2)				1371,02		0,5	0,5		
2.106.3(4)				1453,85		0,5	0,5		
2.106.6		113·106=11978	$5{,}09476\cdot10^{-7}$	1372,93	»	0,5	0,5	»	$4{,}08673\cdot10^3$
2.106.8				1455,54		0,5	0,5		
2.106.9(10)				1454,18		0	1		

Таблица 9 (продолжение)

Обозначение в ПЗМ	Обозначение обычное	K	$1-\beta_1^2$	m	q	J_n	J_{max}	μ	q_1^2
2.107.1(2)				1358,22	1,000000(10)	0,5	0,5	0,978(1,03)	
2.107.3(4)				1440,28	0,99994(3)	0,5	0,5	0,971(1,03)	
2.107.6		113·107=12091	$5{,}09476\cdot10^{-7}$	1360,12	0	0,5	0,5	$2{,}69\cdot10^{-2}$	$4{,}01076\cdot10^{3}$
2.107.8				1441,96	0	0,5	0,5	$3{,}03\cdot10^{-2}$	
2.107.9(10)				1440,61	0; ±1	0	1	0,978(1,03)	
2.108.1(2)				1345,66		0,5	0,5		
2.108.3(4)				1426,96		0,5	0,5		
2.108.6		113·108=12204	То же	1347,54	То же	0,5	0,5	То же	$3{,}93688\cdot10^{3}$
2.108.8				1428,62		0,5	0,5		
2.108.9(10)				1427,29		0	1		
2.109.1(2)				1333,34		0,5	0,5		
2.109.3(4)				1413,89		0,5	0,5		
2.109.6		113·109=12317	»	1335,20	»	0,5	0,5	»	$3{,}86503\cdot10^{3}$
2.109.8				1415,54		0,5	0,5		
2.109.9(10)				1414,22		0	1		
2.110.1(2)				1321,23		0,5	0,5		
2.110.3(4)				1401,05		0,5	0,5		
2.110.6		113·110=12430	»	1323,08	»	0,5	0,5	»	$3{,}79512\cdot10^{3}$
2.110.8				1402,69		0,5	0,5		
2.110.9(10)				1401,38		0	1		
2.111.1(2)				1309,35		0,5	0,5		
2.111.3(4)				1388,45		0,5	0,5		
2.111.6		113·111=12543	»	1311,18	»	0,5	0,5	»	$3{,}72710\cdot10^{3}$
2.111.8				1390,07		0,5	0,5		
2.111.9(10)				1388,77		0	1		
2.112.1(2)				1297,67		0,5	0,5		
2.112.3(4)				1376,07		0,5	0,5		
2.112.6		113·112=12656	»	1299,48	»	0,5	0,5	»	$3{,}66089\cdot10^{3}$
2.112.8				1377,67		0,5	0,5		
2.112.9(10)	ε^0 (600)			1376,39		0	1		

2.113.1(2) 2.113.3(4) 2.113.6 2.113.8 2.113.9(10)	ε^0 (600)	113·113=12769	»	1286,21 1363,91 1288,00 1365,50 1364,23	»	0,5 0,5 0,5 0,5 0	0,5 0,5 0,5 0,5 1	»	$3{,}59643\cdot10^3$
2.114.1(2) 2.114.3(4) 2.114.6 2.114.8 2.114.9(10)		113·114=12882	»	1274,94 1351,97 1276,72 1353,54 1352,28	»	0,5 0,5 0,5 0,5 0	0,5 0,5 0,5 0,5 1	»	$3{,}53366\cdot10^3$
2.115.1(2) 2.115.3(4) 2.115.6 2.115.8 2.115.9(10)		113·115=12995	»	1263,87 1340,23 1265,64 1341,79 1340,54	»	0,5 0,5 0,5 0,5 0	0,5 0,5 0,5 0,5 1	»	$3{,}47252\cdot10^3$
2.134.1(2) 2.134.3(4) 2.134.6 2.134.8 2.134.9(10)		113·134=15142	$5{,}09475\cdot10^{-7}$	1084,94 1150,48 1086,45 1151,82 1150,75	»	0,5 0,5 0,5 0,5 0	0,5 0,5 0,5 0,5 1	»	$2{,}55823\cdot10^3$
2.135.1(2) 2.135.3(4) 2.135.6 2.135.8 2.135.9(10)		113·135=15255	То же	1076,92 1141,98 1078,42 1143.31 1142,24	»	0,5 0,5 0,5 0,5 0	0,5 0,5 0,5 0,5 1	»	$2{,}52051\cdot10^3$
2.136.1(2) 2.136.3(4) 2.136.6 2.136.8 2.136.9(10)		113·136=15368	»	1069,01 1133,60 1070,50 1134,92 1133,86	»	0,5 0,5 0,5 0,5 0	0,5 0,5 0,5 0,5 1	»	$2{,}48361\cdot10^3$
2.137.1(2) 2.137.3(4) 2.137.6 2.137.8 2.137.9(10)		113·137=15481	»	1061,22 1125,34 1062,70 1126,65 1125,60	»	0,5 0,5 0,5 0,5 0	0,5 0,5 0,5 0,5 1	»	$2{,}44752\cdot10^3$

Таблица 9 (продолжение)

Обозначение в ПЗМ	Обозначение обычное	K	$1-\beta_1^2$	m	q	J_n	J_{max}	μ	q_1^2
2.138.1(2)				1053,55	1,000000(10)	0,5	0,5	0,978(1,03)	
2.138.3(4)				1117,20	0,99994(3)	0,5	0,5	0,971(1,03)	
2.138.6		113·138=15594	$5{,}09475\cdot10^{-7}$	1055,02	0	0,5	0,5	$2{,}69\cdot10^{-2}$	$2{,}41221\cdot10^{3}$
2.138.8				1118,50	0	0,5	0,5	$3{,}03\cdot10^{-2}$	
2.138.9(10)				1117,45	0; ±1	0	1	0,978(1,03)	
2.139.1(2)				1045,98		0,5	0,5		
2.139.3(4)				1109,17		0,5	0,5		
2.139.6		113·139=15707	То же	1047,44	То же	0,5	0,5	То же	$2{,}37765\cdot10^{3}$
2.139.8				1110,46		0,5	0,5		
2.139.9(10)				1109,43		0	1		
2.140.1(2)				1038,52		0,5	0,5		
2.140.3(4)				1101,26		0,5	0,5		
2.140.6		113·140=15820	»	1039,97	»	0,5	0,5	»	$2{,}34384\cdot10^{3}$
2.140.8				1102,55		0,5	0,5		
2.140.9(10)				1101,52		0	1		
2.141.1(2)				1031,17		0,5	0,5		
2.141.3(4)				1093,47		0,5	0,5		
2.141.6		113·141=15933	$5{,}09474\cdot10^{-7}$	1032,61	»	0,5	0,5	»	$2{,}31074\cdot10^{3}$
2.141.8				1094,74		0,5	0,5		
2.141.9(10)				1093,72		0	1		
2.142.1(2)				1023,92		0,5	0,5		
2.142.3(4)				1085,78		0,5	0,5		
2.142.6		113·142=16046	То же	1025,35	»	0,5	0,5	»	$2{,}27834\cdot10^{3}$
2.142.8				1087,05		0,5	0,5		
2.142.9(10)				1086,03		0	1		
2.143.1(2)				1016,78		0,5	0,5		
2.143.3(4)				1078,20		0,5	0,5		
2.143.6		113·143=16159	»	1018,20	»	0,5	0,5	»	$2{,}24662\cdot10^{3}$
2.143.8				1079,46		0,5	0,5		
2.143.9(10)	η^0			1078,45		0	1		

2.144.1(2) 2.144.3(4) 2.144.6 2.144.8 2.144.9(10)	η^0	113·144=16272	»	1009,73 1070,73 1011,14 1071,98 1070,98	»	0,5 0,5 0,5 0,5 0	0,5 0,5 0,5 0,5 1	»	$2{,}21555\cdot10^3$
2.145.1(2) 2.145.3(4) 2.145.6 2.145.8 2.145.9(10)		113·145=16385	»	1002,78 1063,36 1004,18 1064,60 1063,61	»	0,5 0,5 0,5 0,5 0	0,5 0,5 0,5 0,5 1	»	$2{,}18513\cdot10^3$
2.146.1(2) 2.146.3(4) 2.146.6 2.146.8 2.146.9(10)		113·146=16498	»	995,923 1056,09 997,313 1057,32 1056,34	»	0,5 0,5 0,5 0,5 0	0,5 0,5 0,5 0,5 1	»	$2{,}15533\cdot10^3$
2.147.1(2) 2.147.3(4) 2.147.6 2.147.8 2.147.9(10)		113·147=16611	»	989,161 1048,92 990,542 1050,14 1049,16	»	0,5 0,5 0,5 0,5 0	0,5 0,5 0,5 0,5 1	»	$2{,}12613\cdot10^3$
2.148.1(2) 2.148.3(4) 2.148.6 2.148.8 2.148.9(10)		113·148=16724	»	982,491 1041,85 983,862 1043,06 1042,09	»	0,5 0,5 0,5 0,5 0	0,5 0,5 0,5 0,5 1	»	$2{,}09752\cdot10^3$
2.149.1(2) 2.149.3(4) 2.149.6 2.149.8 2.149.9(10)	K_L^0	113·149=16837	»	975,910 1034,87 977,272 1036,07 1035,11	»	0,5 0,5 0,5 0,5 0	0,5 0,5 0,5 0,5 1	»	$2{,}06949\cdot10^3$

Таблица 9 (окончание)

Обозначение		K	$1-\beta_1^2$	m	q	J_n	J_{max}	μ	q_1^2
в ПЗМ	Обычное								
2. *op.* 1 (2)				26,7390	0,9998 (34)	0,5	0,5	0,977 (1,03)	–
2. *op.* 3 (4)				28,3566	1,0010 (20)	0,5	0,5	0,968 (1,03)	
2. 5846.6		$113 \cdot 5846 = 660598$	$5,09121 \cdot 10^{-7}$	26,7763	0	0,5	0,5	$3,00 \cdot 10^{-2}$	1,44570
2. 5846.8				28,3894	0	0,5	0,5	$3,34 \cdot 10^{-2}$	
2.5846.9 (10)				28,3610	$0; \pm 1$	0	1	0,977 (1,03)	
Третий ряд									
3.1.(2)				13967,3	1,00000 (4)	0,5	9,5	1,005 (1,001)	
3.1.3 (4)				14814,6	0,9997 (6)	0,5	9,5	1,001 (1,003)	$3,43415 \cdot 10^8$
3.1.6		$33215 \cdot 1 = 33215$	$6,33362 \cdot 10^{-10}$	13967,3	0	0,5	9,5	$0,946 \cdot 10^{-3}$	
3.1.8				14814,6	0	0,5	9,5	$1,06 \cdot 10^{-2}$	
3. 2. 1 (2)				6883,68			4,5		
3. 2. 3 (4)				7407,32	То же	То же	4,5	То же	$8,58541 \cdot 10^7$
3. 2. 6	Ψ (3695)	$33215 \cdot 2 = 66430$	То же	6983,68			4,5		
3. 2. 8	Ψ (2105) (3695)			7407,32			4,5		
3. 3. 1 (2)				4655,81			3,5		
3. 3. 3 (4)				4938,23	»	»	3,5	»	$3,81576 \cdot 10^7$
3. 3. 6		$33215 \cdot 3 = 99645$	»	4655,81			3,5		
3. 3. 8	Ψ (3105)			4938,24			3,5		
3. 4. 1 (2)				3491,88			2,5		
3. 4. 3 (4)				3703,69	»	»	2,5	»	$2,14637 \cdot 10^7$
3. 4. 6		$33215 \cdot 4 = 132860$	»	3491,88			2,5		
3. 4. 8				3703,70			2,5		
3. 72. 3	μ^-	$33215 \cdot 72 = 2391480$	»	206,308	0,99971		0,5	1,00127	$6,62681 \cdot 10^4$
3. 72. 4	μ^+								
3. *op.* 3	e^-	$33215 \cdot 16009 =$	$6,33347 \cdot 10^{-10}$	1,00000	1,00000	»	0,5	1,00116	1,44455
3. *op.* 4	e^+	$= 531738935$							

2. У всех оптимальных состояний наблюдается наименьшее различие между параметрами частиц и античастиц.

3. Значения фундаментальных и электрических зарядов у оптимальных частиц разных рядов очень близки по абсолютным значениям несмотря на то, что массы оптимальных частиц существенно уменьшаются по мере увеличения номера ряда. В первых трех рядах их отношение равно 1836; 28; 1.

4. Суммарное число структурных образований, «спрятанных» под сферой Шварцшильда и проявляющихся во втором подпространстве $n = (n_1 + n_2)/2$ растет от ряда к ряду примерно обратно пропорционально кубу массы оптимальных частиц.

5. Скорости осцилляции во втором подпространстве растут от ряда к ряду, приближаясь к предельной скорости распространения сигнала в первом и втором подпространствах c.

В теоретическом каталоге элементарных частиц введены следующие обозначения.

1. Номер частицы, в котором через точку указаны номер ряда, номер мультиплета в нем, номер состояния в мультиплете. (Имеется в виду мультиплет ПЗМ, т. е. набор частиц, параметры которых однозначно определяются из одного и того же фундаментального квантового числа K). Так, 1.1.1 означает частицу первого ряда, первого мультиплета и первого состояния. Для оптимальных точек в ряду вместо номера соответствующего мультиплета проставлен знак *ор*.
2. «Обычное», т. е. до сих пор принятое обозначение частицы, с которой сопоставляются теоретически рассчитанные ее параметры. Например, с теоретически рассчитанной оптимальной частицей первого ряда 1. *ор*.1 сопоставляется протон, обозначаемый сейчас p.
3. Численное значение фундаментального квантового числа K, которое служит единственным аргументом для определения безразмерных параметров всех частиц, входящих в данный мультиплет.
4. β_1 — число, показывающее, насколько отличается от единицы отношение скорости движения наружных субчастиц во втором подпространстве (не наблюдаемое в первом) к скорости света c.
5. m — безразмерное число, соответствующее массе частицы, выраженной в массах электрона оптимальной частицы третьего ряда, масса которой принята за единицу.
6. q — электрический заряд частицы, выраженный в $\sqrt{\alpha\hbar c}$, где α — постоянная — тонкой структуры (теоретически найденная в ТФП $\alpha = 7{,}297321 \cdot 10^{-3}$); $\hbar$ — постоянная Планка; c — скорость света. Мировые константы $\hbar$ и c взяты как единицы масштаба, их численные значения не отражаются на расчете, а служат только для сравнения рассчитанных безразмерных величин с опытными значениями соответствующих параметров. Следовательно, безразмерный заряд частицы указан в зарядах электрона. Как видно из табл. 9, заряд частиц, являющийся разностью зарядов фундаментального поля, которые сами меняются на много порядков, практически остается неизменным для всех частиц и равным единице. Этот известный из опыта факт до сих пор не имел объяснения.
7. J — спин, рассматриваемый в ТФП как проекция механического момента частицы на ось прецессии (она же ось ориентации), выражен в единицах $\hbar$. Значения спина, указанные справа, соответствуют еще не нормализованным состояниям, у которых спин не успевает нормализоваться и поэтому может иметь большое значение (в табл. 9 дано максимально возможное).

8. μ — магнитный момент частиц в безразмерных единицах — собственных магнетонах.
9. q_1^2 — квадрат наружного фундаментального заряда, непосредственно проявляющегося только во втором и третьем подпространствах, в $\hbar c$, т. е. в безразмерных единицах.

Каталог элементарных частиц. ТФП позволяет проводить теоретический расчет всех основных параметров ЭЧ, систематизацию их по ПЗМ и отбор по соответствующим критериям тех частиц, которые подлежат регистрации в проводящихся сейчас экспериментах.

Результаты такого расчета, выполненные по расчетным формулам табл. 7 по методике, соответствующей блок-схеме, приведенной на рис. 5, сведены в табл. 9. В этом каталоге указаны мультиплеты ПЗМ, которые могут содержать наблюдаемые частицы. Критерии отбора допускают наблюдение частиц, входящих во второй ряд под номерами от 1 до 156; в каталог включена часть этих мультиплетов. Мультиплеты первого ряда, удовлетворяющие критерию отбора, приведены полностью.

В настоящее время найденные в ТФП и ПЗМ критерии отбора частиц еще не настолько определенны, чтобы на их основе получить окончательный отбор всех подлежащих наблюдению частиц. Это относится как к отбору мультиплетов, так и к отбору частиц внутри мультиплета. Основной трудностью, мешающей полному завершению этой проблемы, является отсутствие в ТФП законченной теории нормализации частиц вакуумом. Поэтому отбор, на основе которого составлен каталог, носит еще предварительный характер.

Когда m, J и μ известны, то отождествление предсказанных и открытых ЭЧ однозначно: $p^{\pm}$, n, $\tilde{n}$, $e^{\pm}$, $\mu^{\pm}$, $\pi^{\pm}$ и др. Если известны только m и Γ, то однозначное отождествление сложно (Δ (2420); X (1440) и другие частицы).

Кроме основных и составных состояний ЭЧ, указанных в табл. 9, можно фиксировать и «сдвоенные» состояния ЭЧ. Их массы определяются как средние арифметические составляющих, а другие параметры берутся из табл. 9. Для резонансов такие состояния возможны у частиц с $\Gamma < 21$ *Мэв*, например сдвоенные состояния: Λ^0 (2.66.6 и 2.67.6); η^0 (1.32.5 и 1.33.5) и др. К ним же относятся частицы ψ (3695) и ψ (3105), открытые в 1974 г. [60], т. е. состояния (3.2.6 и 3.2.8) и (3.2.8 и 3.3.8), в третьем ряду (лептонные состояния) и (2.20.6 и 2.24.6) во втором ряду (адронные состояния). Каждая из этих частиц есть суперпозиция резонансов с $\tau < 10^{-23}$ *сек* и массами из табл. 9. Так, масса ψ (3105) равна $(7407 + 4938) : 2 = 6173 m_e = 3154$ *Мэв*. Резонансы, из которых составлены ψ-частицы можно наблюдать.

В 1969 г. [7] были предсказаны параметры многих частиц, открытых к 1974 г. Из 21 мультиплета, включенного в «Перечень частиц, вероятность обнаружения которых в ближайшие годы имеет наибольшее значение» [7], уже обнаружено 15 и в том числе ψ-частицы. Резко возросший уровень экспериментов сделал этот перечень устаревшим. Сейчас большая часть еще не открытых частиц, предсказанных в табл. 9, может быть обнаружена.

Для всех частиц, как проявляющихся в первом подпространстве в виде самостоятельных объектов — ЭЧ, так и непосредственно не наблюдаемых в первом подпространстве, но проявляющихся в нем через взаимодействия с наблюдаемыми частицами, т. е. для виртуальных частиц, справедливы одни и те же расчетные формулы. Разница только в том, что виртуальное частицы не проходят через критерий отбора.

Теоретический каталог элементарных частиц, публикуемый впервые, содержит много информации об элементарных частицах, бо́льшая часть которой является предсказанием.

Впервые расчетные формулы для определения параметров ЭЧ были опубликованы в 1966 [6] и 1969 [7] гг. В последней работе они еще не содержали критерия отбора, но были уже достаточно точными для получения параметров, которые можно сопоставлять с экспериментом.

С 1969 г. найдено много новых частиц и уточнены параметры ранее обнаруженных. Во всех случаях совпадение с теоретически найденными значениями оказалось полным. Следовательно, можно констатировать, что предсказания, сделанные в рамках теории периодического закона микрочастиц подтверждены экспериментом.

ТФП и свойства атомов вещества

В начале этого раздела было указано, что теория, в которой достаточно полно отражены свойства ЭЧ вещества, должна дать обширную информацию, необходимую для завершения теории атомов, атомных ядер и кристаллов. В последующих разделах этой книги, посвященных ядрам атомов, электронным оболочкам атомов, молекулам и кристаллам, будет обстоятельно показано, какую роль в этих вопросах может играть ТФП. В заключение этого раздела нам представляется необходимым рассказать о двух весьма специфических элементарных частицах, играющих большую роль в формировании атомной материи.

В [6, 7] было указано, что процесс перехода частиц из одного состояния в другое невозможен без того, чтобы во время этого перехода на некоторое, принципиально нерегистрируемое в первом подпространстве виртуальное время частица, состоящая во втором подпространстве из большого числа дискретных субчастиц, превратилась бы в круговой ток, как бы состоящий из бесконечно большого числа субчастиц. В этот же промежуток времени масса пары субчастиц в третьем подпространстве (а в нем у всех частиц и во всех состояниях всегда имеется только пара субчастиц) будет стремиться к нулю, а скорость — к бесконечно большой величине. Скорость кругового тока во втором подпространстве будет равна c.

Виртуальное состояние, через которое проходят все частицы при взаимных превращениях, было названо в [6] «нейтринным». Это связано с тем, что в подавляющем числе случаев частица, переходя в новое состояние, для сохранения фундаментального заряда должна в процессе реакции с другой частицей испустить или поглотить часть кругового тока. Эта «отколовшаяся» часть не может уже самостоятельно образовать дискретное устойчивое состояние и будет «блуждать» в вакууме в таком квазистационарном состоянии до тех пор, пока не будет поглощена ЭЧ или одной из античастиц, входящих в ЭЧВ. Такую очень своеобразную частицу сейчас называют «нейтрино». Нейтрино далеко не всегда может поглотиться вакуумом и остаться внутри ЭЧВ, вызвав только излучение. В подавляющем числе случаев оно будет переходить от одной возбужденной частицы вакуума к другой, пока не появятся условия, необходимые для его поглощения частицей вакуума. Процесс перехода нейтрино от одной частицы вакуума к другой сопровождается поляризацией и деполяризацией ЭЧВ и этим во многом совпадает с описанным распространением возбуждения в вакууме — с процессом распространения света. Однако он сопровождается не передачей энер-

гии возбуждения от одной возбужденной ЭЧВ к другой, а передачей нейтрино. Поэтому аналогично фотонам нейтрино распространяется в вакууме со скоростью света.

В нейтринное состояние могут войти на некоторое время и устойчивые состояния частиц. Так, электрон может оказаться на очень короткое, виртуальное время в нейтринном состоянии; если при этом в центре его окажется протон (во втором пространстве радиус у электрона примерно в 1836 раз больше радиуса протона), то электрическое поле протона может «сжать» нейтринное состояние электрона до радиуса, близкого к протонному. Такое нейтринное состояние электрона мы назвали «метоном» — метаэлектроном.

Система протон—метон при отсутствии внешних полей может существовать в масштабе атомных времен долго, а при наличии благоприятных внешних полей или при возможности обмена двух протонов одним метоном время жизни такой системы может быть очень большим. Легко понять, что система протон — метон есть свободный нейтрон, а система два протона — один метон есть пара нуклонов, которая имеет наиболее благоприятные условия для долгого существования в ядре, поскольку она защищена там от внешних воздействий.

Наряду с анизотропией электрического поля частиц, прецессией оси вращения субчастиц системы: заряженная частица — метон или заряженная частица — «мемон» (сжатое нейтринное состояние мюона) явно должны играть большую роль в жизни атомов и их ядер.

До сих пор физики недоумевают, зачем природе мюон? По-видимому, для того, чтобы посредством своего возбужденного состояния, будучи не мюоном, а мемоном, вносить свой вклад в формирование структуры атомной материи. Роль мемона авторами изучена еще очень мало.

РЕЗЮМЕ

1. Данный раздел содержит краткое изложение некоторых основных положений единой релятивистской квантовой теории фундаментального поля, ответственного за все виды взаимодействий в веществе. Основное внимание уделяется выявлению новых свойств элементарных частиц, существенных при изучении свойств атомов и кристаллов [7—12, 58 и 59].
2. Упоминаются основы математического формализма дискретно-континуальной римановой геометрии, который используется для записи основных уравнений ТФП и позволяет учесть квантовые свойства вещества уже на уровне исходных аксиом [7—12, 56—59].
3. С использованием нового математического формализма записываются основные уравнения ТФП, в которых аналогично уравнениям ОТО рассматриваются силовые поля в пространствах Эйнштейна, с тем существенным отличием, что кривизну пространства характеризует не гравитационное поле, а фундаментальное поле, ответственное за сильное, электромагнитное, слабое и гравитационное взаимодействия в веществе.
4. Показывается, что в ТФП существует конечный и дискретный ряд устойчивых и квазиустойчивых состояний — элементарных частиц — и что при аннигиляции частиц и античастиц они не исчезают бесследно, а создают элементарные частицы вакуума. Последние не наблюдаемы в макропространстве, но играют огромную (если не определяющую) роль в процессах взаимодействия и формирования возбужденных состояний ЭЧВ, т. е. ЭЧ. Вакуум порождает и случайные процессы в микромире.

5. Устанавливается периодический закон микрочастиц, в рамках которого систематизируются все ЭЧ. Выводятся формулы для расчета основных параметров ЭЧ: масс, зарядов, спинов, магнитных моментов. Безразмерный спектр этих теоретически найденных значений сведен в каталог (см. табл. 9), в котором содержатся как известные частицы, так и еще не обнаруженные; известные из опыта параметры частиц и еще не измеренные.
6. Показывается, что ЭЧ взаимодействуют между собой, в том числе и при формировании устойчивых структур (ядро атома, атом, кристалл) в ненаблюдаемом в макромире втором подпространстве, которое для макронаблюдателя находится как бы под сферой Шварцшильда. Во втором подпространстве электрическое поле частиц обладает резкой анизотропией, без учета которой нельзя полностью описать взаимодействие частиц. Найдены формулы для ее расчета.
7. Показывается, что во втором подпространстве частицы как бы состоят из множества невзаимодействующих точечных субчастиц. Такая структура частиц была описана еще в 1966 г. [6]. В 1969 г. Р. Фейнман, анализируя поведение сильно взаимодействующих частиц, выдвинул гипотезу о многоточечной структуре частиц, названной им «партонной». Модель частиц в ТФП во многом соответствует партонной модели в ультрарелятивистском случае—когда субчастицы движутся с очень большой скоростью и модель становится плоской.
8. Модель частиц в ТФП не сохраняется плоской вследствие прецессии оси вращения субчастиц. Конус прецессии, описываемый осью вращения, и угол прецессии с учетом резкой анизотропии поля по отношению к оси вращения играют определяющую роль в формировании структур, составленных из ЭЧ (ядра атомов, атомы, кристаллы).
9. Показывается, что возможность рассмотрения частиц в разных дополнительных одно к другому (в математическом смысле) подпространствах квазиклассически в c-числах не противоречит, а, наоборот, укрепляет квантовый принцип неопределенности. В то же время это расширяет возможности даже обычного квантовомеханического анализа частиц, поскольку допускает новый подход при решении уравнения Шредингера, при нахождении волновых функций, например, в атоме.

Литература

1. Particle Data Group. Phys. Letters. 1974, v. 50, BN 1.
2. *Г. Челлен.* Физика элементарных частиц. М., «Наука», 1966.
3. *Дж. Бернстейн.* Элементарные частицы и их токи. М., «Мир», 1970.
4. *П. Коллинз, Э. Сквайрс.* Полюса Редже в физике частиц. М., «Мир», 1971.
5. *Ю. В. Новожилов.* Введение в теорию элементарных частиц. М., «Наука», 1972.
6. *И. Л. Герловин.* Некоторые вопросы систематизации элементарных частиц. Л., ГАО АН СССР. Депонент ВИНИТИ № 111-67. М., 1966.
7. *И. Л. Герловин.* Систематизация элементарных частиц и соображения об основах будущей теории. Препринт ИТФ АН УССР, № 69—53. Киев, 1969.
8. *И. Л. Герловин.* Симметрия в структуре элементарных частиц и вакуума.— Сб. «Симметрия в природе». Л., НТГО, 1971.
9. *И. Л. Герловин.* Природа света и некоторых физических явлений. Горький, ОГИЗ, 1945.
10. *И. Л. Герловин.* Некоторые вопросы систематизации элементарных частиц.— Сб. «Математическая физика, электродинамика, история физики». М., МОИП. 1967. Сб. «Философский аспект проблемы релятивизма. Философские проблемы теории относительности». М., МОИП, МГУ, 1968.

11. *И. Л. Герловин.* Тезисы докладов на научной конференции. Л., ЛИАП, 1967, 77; 1968, 116; 1970, 226.
12. *И. Л. Герловин.* Основы единой релятивистской квантовой теории фундаментального поля (ТФП). Л., ГАО АН СССР. Депонент ВИНИТИ, № 7084—73, 1973.
13. *Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц.* Теория поля. М., «Наука», 1967.
14. *А. А. Изместьев.* ТМФ, 1971, т. 7, № 3, 358.
15. *E. Newman.* J. Math. Phys., 1972, v. 14, N 1, 102.
16. *R. P. Kerr.* Phys. Rev. Letters, 1963, v. 11, 237.
17. *B. Carter.* Phys. Rev. Letters, 1971, v. 26, 531.
18. *К. Меллер.* Теория относительности. М., «Наука», 1972.
19. *В. А. Крат, И. Л. Герловин.* Докл. АН СССР, 1974, т. 215, 305.
20. *Дж. М. Займан.* Современная квантовая теория. М., «Мир», 1971.
21. *В. А. Фок.* Теория пространства, времени и тяготения. М., ГИТТЛ, 1961.
22. *Р. Пенроуз.* Структура пространства — времени. М., «Мир», 1972.
23. *Л. Бриллюэн.* Новый взгляд на теорию относительности. М., «Мир», 1972.
24. *Я. Б. Зельдович, И. Д. Новиков.* Релятивистская астрофизика. М., «Наука», 1967.
25. *И. В. Мицкевич.* Физические поля в ОТО. М., «Наука», 1970.
26. *B. Carter.* Phys. Rev., 1968, v. 174, 1559.
27. *J. A. Graves, D. Brill.* Phys. Rev., 1960, v. 120, 1507.
28. *J. A. Wheeler.* Neutrinos, Gravitation and Geometry. Bologna, 1960.
29. *Дж. А. Уилер.* Предвидение Эйнштейна. М., «Мир», 1970.
30. *М. А. Марков.* ЖЭТФ, 1968, № 51, 378.
31. *К. П. Станюкович.* Гравитационное поле и элементарные частицы. М., «Наука», 1965.
32. *А. Х. Каплан.* ЖЭТФ, 1949, № 10.
33. *H. Hönl.* Ergebnisse der exacten Naturwiss., 1952, Bd. v. 23, 160.
34. *P. A. M. Dirac.* Canad. J. Math., 1950, N 2, 129.
35. *P. A. M. Dirac.* Proc. Roy. Soc. London, 1958, v. 246, 326, 333.
36. *P. A. M. Dirac.* Phys. Rev., 1959, v. 114, 924.
37. *B. S. De Witt.* Rev. Mod. Phys., 1957, v. 29, 377.
38. *P.W . Higgs.* Phys. Rev. Letters, 1958, № 1. 373.
39. *P. W. Higgs.* Phys. Rev. Letters, 1959, № 3, 66.
40. *M. A. Markov.* Progr. Theor. et Phys. Yukawa Suppl., 1948, 85.
41. *И. Е. Тамм.* Основы теории электричества. М., Гостехиздат, 1949.
42. *Р. Беккер.* Теория электричества. М., ГИТТЛ, 1941.
43. *D. Bohm,* W. Weinstein. Phys. Rev., 1948, v. 74, 1789.
44. *М. А. Марков.* ЖЭТФ, 1946, № 8, 800.
45. *Е. Фрадкин.* ЖЭТФ, 1950, № 20, 211.
46. *М. Натанзон.* ЖЭТФ, 1953, № 24, 448.
47. *Д. Д. Иваненко, А. А. Соколов.* Классическая теория поля. М., ГИТТЛ, 1951.
48. *G. H. Goedecke.* Phys. Rev., 1964, v. 135, 281.
49. *G. H. Goedecke, G. B. Arnett.* Phys. Rev., 1968, v. 168, 1424.
50. *A. Sommerfeld.* Nachr. Acad. Goettingen, Math. Phys. Kb., 11 a, Math. Phys. Chem. Abt. 1904, 99 and 363; 1905, 201.
51. *P. Hertz.* Math. Ann., Bd. 65, N 1, 1908.
52. *G. A. Schott.* Philos. Mag. Suppl., 1933, № 7, v. 15, 752.
53. *Г. И. Ватсон.* Теория бесселевых функций. М., ИИЛ, 1949.
54. *И. М. Рыжик и И. С. Градштейн.* Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М., ГИТТЛ, 1961.
55. *Н. К. Кобозев.* Исследование в области термодинамики процессов информации и мышления. М., МГУ, 1971.
56. *П. К. Рашевский.* Риманова геометрия и тензорный анализ. М., «Наука», 1967.
57. *А. З. Петров.* Новые методы в общей теории относительности. М., «Мир», 1966.
58. *V. A. Krat, I. L. Gerlovin.* Astroph. and Space Science, 1974, v. 26, 521.
59. *V. A. Krat, I. L. Gevlovin.* Astroph. and Space Science, 1975, v. 33. 5.
60. *G. S. Abrams et all.* Discovery of a Second Narrow Resonance in e^+ e^- Annihilation.— Phys. Rev. Letters. 1974, v. 33, N 24.

II. ПЕРИОДИЧЕСКАЯ СИСТЕМА ЭЛЕМЕНТОВ

Глава 1

СОСТОЯНИЕ ВОПРОСА

В 1869 г. были известны 62 химических элемента, определены их атомные веса (иногда ошибочно) и ряд физических и химических свойств. Уже возникло представление об атомности или валентности элементов и делались некоторые попытки объединения сходных элементов в естественные группы. Но только Д. И. Менделееву [1—10] удалось получить действительно стройную систему элементов. В то время еще не существовало представлений о внутреннем строении атомов и не было известно даже общее их число.

В качестве координат Д. И. Менделеев принял для своей системы два основных признака: атомный вес и валентность по отношению к кислороду и водороду. При определении места элемента в таблице он учитывал атомные объемы, изоморфизм и некоторые другие свойства элементов. Он установил восемь групп элементов:

Группа	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII
Высшие окислы	R_2O_1	R_2O_2	R_2O_3	R_2O_4	R_2O_5	R_2O_6	R_2O_7	R_2O_8
Высшие водородные соединения	—	—	—	RH_4	RH_3	RH_2	RH_1	—

В литературе чаще всего встречаются следующие модификации периодической системы Менделеева: 1) короткая форма, 2) полудлинная форма, 3) длинная форма, 4) ступенчатая форма, предложенная Томсеном и Бором.

За истекшие сто лет было предложено свыше 1000 вариантов построения периодической таблицы элементов Менделеева на плоскости или даже в объеме.

Для облегчения сравнения наиболее распространенных форм таблицы построим диаграмму (рис. 1), на которой по горизонтали разместим группы элементов, а по вертикали — их атомные веса A. Черными кружками отмечены элементы, уже известные в 1871 г., а белыми — тогда еще не открытые. Элементы, относящиеся к одному ряду таблицы Менделеева, соединены отрезками прямых. Как видим, линии эти получились зигзагообразными и в них много пропусков. Приблизительно выдерживается только общее направление каждого ряда. Однако, несмотря на это, Д. И. Менделеев сумел заметить в этой недостаточно упорядоченной картине закономерность периодичности, которую не смогли распознать другие ученые. Это позволило ему исправить ошибочно определенные атомные веса ряда элементов и скорректировать в некоторых случаях значения максимальных валентностей, а также предсказать ряд физических и химических свойств еще не открытых к тому времени элементов. Эти свойства он интерполировал между свойствами соседей каждого элемента в таблице по вертикали, по горизонтали и по двум диагоналям.

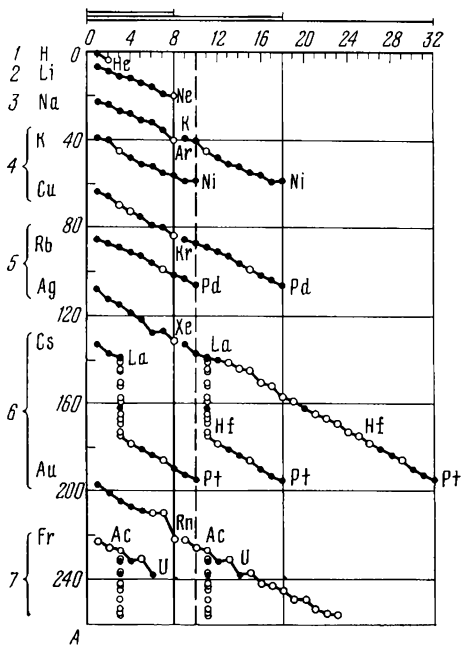


Рис. 1. Графическое изображение таблицы Д. И. Менделеева

Сюда относятся прежде всего свойства экабора (скандия), экаалюминия (галлия) и экасилиция (германия). Совпадение свойств вновь открытых элементов с предсказанными Д. И. Менделеевым определило успех и всеобщее признание периодической системы элементов.

В короткой форме таблицы имеется только 8 групп (столбцов) элементов, в полудлинной — 18, а в длинной — 32.

На рис. 1 показано, что короткая форма получается из полудлинной или длинной, если сдвинуть выступающие концы рядов влево, разместив их между рядами элементов основной части таблицы. При этом близкие по свойствам металлы: Fe, Co, Ni, а также Ru, Rh, Pd, Os, Ir, Pt — Д. И. Менделеев объединил в триады и разместил в восьмой группе таблицы.

В годы создания системы элементов лантанидов было известно очень мало, и существовавшими тогда методами разделить их было весьма трудно, поэтому они были размещены в одной клетке таблицы для лантана. Когда были открыты инертные газы, то Д. И. Менделеев и У. Рамзай решили, что их следует поместить в специальную нулевую группу.

Наряду с атомным весом Д. И. Менделеев придавал большое значение естественному месту каждого элемента в системе. Работами (1912—1913 гг.) Н. Бора, И. Ридберга и Г. Мозли по анализу рентгеновских спектров было показано, что место элемента в таблице Д. И. Менделеева соответствует положительному заряду ядра Z и суммарному числу электронов в оболочке атома. Это дало возможность установить полное число элементов в таблице Д. И. Менделеева и заменить неравномерную и дробную шкалу атомных весов более удобной — равномерной и целочисленной шкалой атомных номеров Z, что только укрепило таблицу элементов Д. И. Менделеева.

На рис. 2 изображена ступенчатая форма таблицы Д. И. Менделеева, предложенная Ю. Томсеном и Н. Бором и экстраполированная в неисследованную область Г. Сиборгом. В ней элементы-аналоги соединены отрезками прямых линий.

Полученные эмпирическим путем схемы последовательного заполнения электронных оболочек атомов показаны на рис. 2, где отмечены элементы, с которых начинается заполнение той или иной электронной оболочки.

Г. Сиборг [9] считает, что при продолжении таблицы Д. И. Менделеева должны быть получены актиниды, аналогичные по свойствам лантанидам. М. Гайсинский [9], например, доказывает, что этой аналогии в действительности нет. Один из них выдвигает на первое место электронное строение атомов, а другой — их химические свойства.

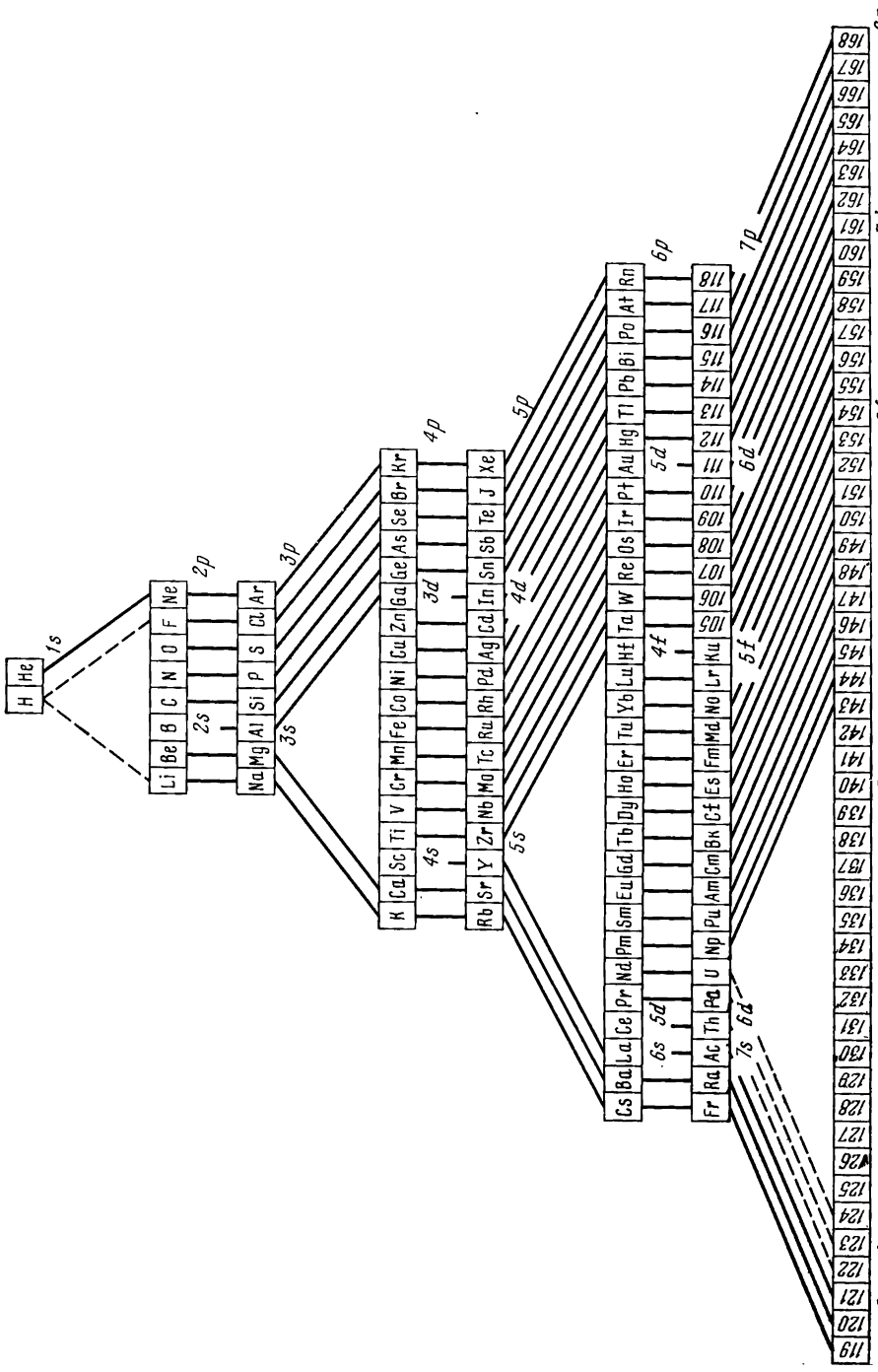


Рис. 2. Ступенчатая форма таблицы Д. И. Менделеева

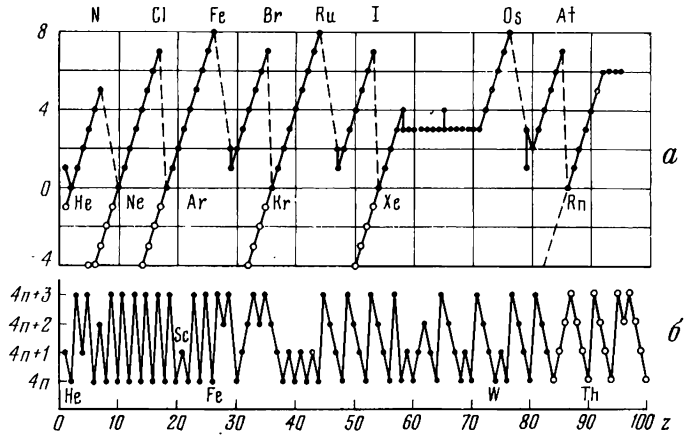


Рис. 3. Сопоставление электронной (*а*) и ядерной (*б*) периодичности

Изучение оптических спектров элементов и создание их квантовой теории позволили характеризовать состояние электронов в атомах набором четырех квантовых чисел: главного n, орбитального l, магнитного m и спинового s — эмпирически определить, в каком состоянии: $s\,(l = 0)$, $p\,(l = 1)$, $d\,(l = 2)$ или $f(l = 3)$ — находятся разные электроны в оболочке атома. Для многоэлектронных оболочек была использована водородоподобная схема, разработанная для одноэлектронного атома водорода, и нулевое приближение, основанное на пренебрежении взаимодействием электронов. Однако водородоподобная схема дает совпадение с таблицей Д. И. Менделеева только в самом ее начале до $Z = 18$.

Это побудило В. М. Клечковского в многочисленных работах, например в [11], вместо водородоподобной схемы заполнения электронных оболочек атомов по n-группам, предложить схему заполнения $(n + l)$-групп, которая существенно расходится с водородоподобной схемой, но зато дает более близкое соответствие с таблицей Д. И. Менделеева.

Весьма полезную информацию, позволяющую глубже разобраться в строении электронных оболочек атомов, дает изучение потенциалов их ионизации [12, 13].

Эмпирически найденные высшие валентности для разных атомов изображены на рис. 3, *а*, где по оси абсцисс нанесены атомные номера Z, а по оси ординат — высшие валентности. Сверху отложены валентности по отношению к кислороду (черные кружки), а снизу — по отношению к водороду (белые кружки).

Сопоставляя этот рисунок со схемой заполнения электронных оболочек, представленной на рис. 2, заметим, что высшая валентность определяется общим числом электронов внешней незаполненной оболочки, а не раздельно s- и p-электронами. Соединяя точки на диаграмме, получим серию параллельных наклонных линий. Эта закономерность нарушается у лантанидов: одни линии доходят до края диаграммы, а другие — нет. Почему это происходит, определить простым счетом электронов в различных квантовых состояниях не удается. Необходимо привлекать данные о потенциалах ионизации атомов и ионов.

Многие исследователи пытались установить закономерности чередования массовых чисел атомов A по мере изменения их атомных номеров Z. Так, на рис. 3, *б* показано изменение массовых чисел для наиболее распространенных и устойчивых изотопов четырых основных семейств [1]: $4n + 0$, $4n + 1$, $4n + 2$ и $4n + 3$. На рисунке изменен порядок расположения этих семейств на указанный выше вместо порядка нечетных и четных семейств, принятого в работе ($4n + 1$, $4n + 3$, $4n + 2$ и $4n$). Кроме того, внесены некоторые коррективы в соответствии с более поздними данными [14].

На рис. 3, *б* видно, что никакой строгой и четкой закономерности в этом чередовании массовых чисел A с изменением зарядов ядер Z не проявляется. Можно только заметить, что устойчивые ядра, для которых $A = 4n$, встречаются почти вдвое чаще, чем ядра, для которых $A = 4n + 2$.

Сопоставление периодичности изменения свойств атомов (см. рис. 3, *а*) и периодичности изменения их массовых чисел (см. рис. 3, *б*) также свидетельствует об отсутствии корреляции между ними.

Эмпирическим путем было установлено существование некоторых магических чисел протонов и нейтронов (2, 8, 20, 28, 50, 82, 126, 184), при которых ядра атомов имеют максимальное число устойчивых изотопов. В связи с этим было введено понятие о протонных и нейтронных ядерных оболочках. Возможные числа протонов и нейтронов в них определялись аналогично числам электронов в электронных оболочках. Однако неравномерное чередование магических чисел вызвало большие затруднения в определении порядка чередования этих оболочек. Подбирая различные формы потенциальной ямы, ученые смогли получить распределение нуклонов по оболочкам только для некоторых первых магических чисел.

Гепперт-Майер [15] предложила использовать вместо орбитального квантового числа суммарный спин ядра для спин-орбитального взаимодействия и получила возможность рассчитать порядок чередования ядерных оболочек, который совпадал со всеми эмпирически найденными магическими числами. В литературе обычно это изображается в виде безмасштабных схем чередования уровней.

На рис. 4 сопоставляются чередования массовых чисел ядер, ядерных оболочек и электронных оболочек атомов. По оси абсцисс отложены атомные номера элементов Z. В нижней части диаграммы вертикальными линиями отмечены границы заполнения электронных оболочек атомов электронами в различных квантовых состояниях (преждевременное появление s-электронов для d-элементов и s- и d-электронов для f-элементов на этой диаграмме опущено).

На рис. 4 показано распределение ядер по массовым числам атомов по тем же четырем основным семействам: $4n + 0$, $4n + 1$, $4n + 2$ и $4n + 3$, только таких семейств указано не одно, а несколько. Сделано это таким образом, чтобы в каждом горизонтальном ряду располагались ядра, отличающиеся одно от другого добавлением α^4-частицы (два протона и два нейтрона). Так, в самой нижней полосе имеется только одно устойчивое ядро (ядро атома водорода — протон).

В следующей полосе идут ядра с массовыми числами 4, 8, 12, 16, 20, 24, 28, 32, 36 и 40. Однако ядра с восемью нуклонами для бериллия неустойчивы и потому опущены в этом ряду. По этой же причине опущен изотоп с массовым числом 36 для аргона, но зато более устойчивый его изотоп с массовым числом 40 помещен уже в следующей полосе, а в рассматриваемой полосе указано ядро для Ca^{40}. При таком способе построения диаграмма

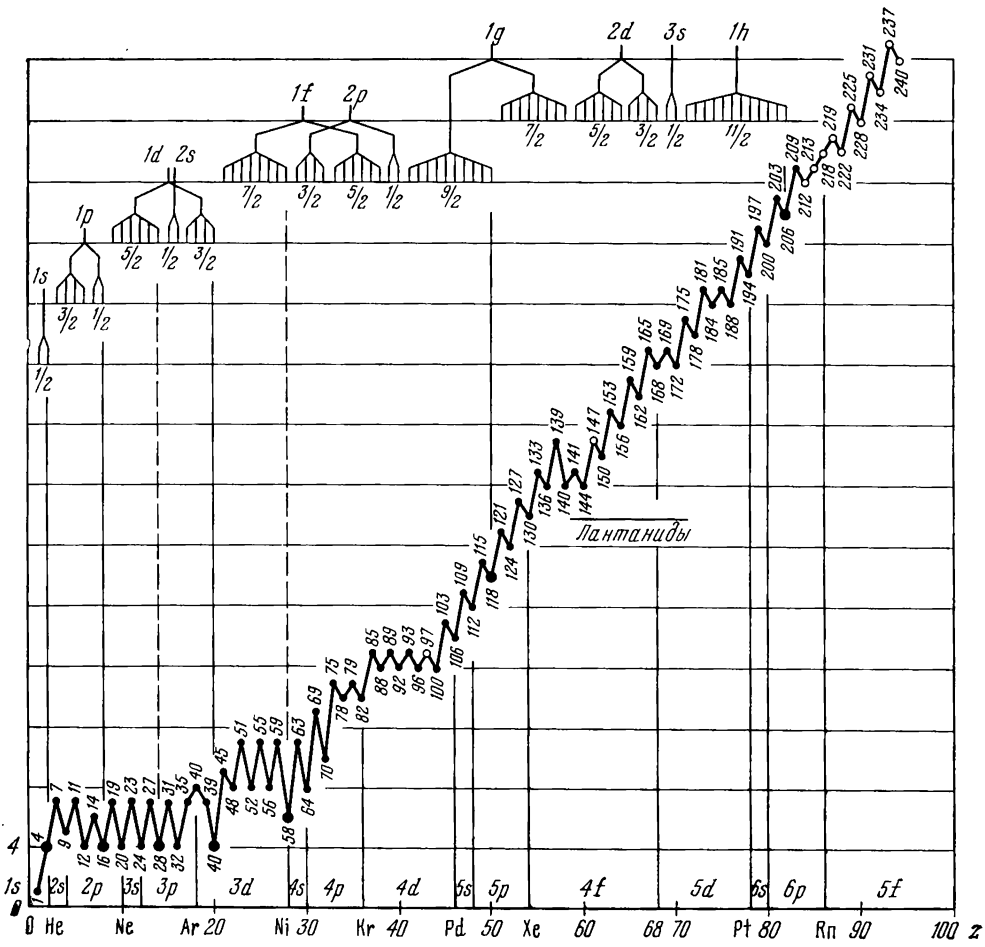


Рис. 4. Сопоставление периодичности электронных оболочек, массовых чисел и ядерных оболочек

принимает вид зигзагообразной линии. Эти кривые характеризуют чередование ядер путем добавления другого типа частицы α^6, состоящей из двух протонов и четырех нейтронов [14]. Такая форма кривой позволяет найти на ней ряд аномальных точек перегиба и указывает на их связь со строением ядерных и электронных оболочек.

Устойчивые изотопы показаны черными, а неустойчивые (хотя и наиболее распространенные) — белыми кружками. Ядра, соответствующие магическим числам протонов, отмечены в виде больших черных кружков. Для каждого из указанных ядер рядом написано значение его массового числа A.

Выше зигзагообразной кривой проведены вертикальные линии на границах ядерных оболочек. Некоторые авторы выделяют кроме магических чисел дополнительно еще число 14, а также считают магическое число 28 не основным. Поэтому для этих чисел вертикальные линии отмечены пунктиром.

Еще выше помещено распределение протонов по ядерным оболочкам на основе спин-орбитальной модели Гепперт-Майер. Обычно на таких схемах

указывается цифрами число протонов (или нейтронов) в каждой подоболочке. Здесь это число символизируется количеством вертикальных линий и совмещено с расположенными ниже зарядами ядер Z или числами протонов в них. Чтобы легче было рассматривать схемы чередования ядерных оболочек, мы сместили их по вертикали одну относительно другой. Сверху помещены обозначения квантовых уровней, а внизу — указаны числа, соответствующие спин-орбитальным взаимодействиям.

Чередование ядерных оболочек получается весьма запутанным. Так, $2s$-оболочка находится между двумя частями $1d$-оболочки. Части $1f$- и $2p$-оболочек переплетаются между собой. Для $1g$-оболочки часть уровней оказывается в одной оболочке, а остальные — в соседней. Между некоторыми квантовыми состояниями имеются границы ядерных оболочек, а в других случаях их нет. Кроме того, если тщательно сравнить чередования ядерных уровней по оболочкам, взятые из разных литературных источников, то можно заметить, что они оказываются неодинаковыми. Поэтому представление о ядерных оболочках на основе спин-орбитального взаимодействия, по-видимому, нуждается в ряде уточнений.

Сопоставляя чередование электронных оболочек атомов в нижней части, массовых чисел ядер в средней части и чередование ядерных уровней в верхней части диаграммы, необходимо отметить следующее.

1. Границы периодов и рядов таблицы Менделеева для He, Ar, Ni и Kr соответствуют характерным точкам и ступеням на средней части диаграммы. Но для Ne, Pd, Xe, Pt и Rn таких точек на периодической кривой для массовых чисел заметить нельзя.

2. Нет связи между средней кривой для массовых чисел и окончанием электронных оболочек в s-состояниях.

3. Нарушение монотонного чередования периодов на средней кривой между Ar и Ca в ядрах совпадает с нарушением монотонного чередования заполнения электронных оболочек и с преждевременным появлением в $3d$-оболочках $4s$-электронов.

4. Ступени на кривой массовых чисел в ядрах явно коррелируют с $3d$- и $4d$-электронными оболочками и с началом и концом заполнения $4f$-электронных оболочек лантанидов.

5. Выбранные границы ядерных оболочек взяты в соответствии с эмпирическими значениями магических чисел протонов. Однако внутри ядерных оболочек не видно соответствия между границами их подоболочек и характерными ступенями на кривой массовых чисел.

Таким образом, можно сделать вывод, что между периодичностью массовых чисел для доминирующих изотопов в ядрах (средняя кривая на рис. 4) и заполнением электронных оболочек атомов имеет место явная корреляция. Поэтому строение электронных оболочек атомов необходимо связывать не только с зарядом ядер Z, но и с числом нуклонов в них и со строением ядер.

Анализируя изложенное в этой главе необходимо отметить следующее.

1. Накоплен обширный эмпирический и теоретический материал о периодическом изменении свойств элементов и атомных ядер. Однако ряд закономерностей еще нуждается в дальнейшем исследовании, развитии и уточнении.

2. Желательно проанализировать причины и закономерности чередования массовых чисел у ядер и выяснить, имеется ли связь этих закономерностей со строением электронных оболочек атомов.

3. Необходимо найти причины существующих противоречий в заполнении электронных оболочек атомов по водородоподобной схеме и по схеме $(n + l)$-групп В. М. Клечковского.

4. Целесообразно изучить закономерности изменения потенциалов ионизации и установить связь их со строением электронных оболочек.

Литература

1. Д. И. Менделеев. Жизнь и труды. М., Изд-во АН СССР, 1957.
2. *Д. Н. Трифонов.* Границы и эволюция периодической системы. М., Госатомиздат, 1963.
3. *В. И. Гольданский.* Новые элементы в периодической системе Д. И. Менделеева. М., Атомиздат, 1964.
4. *Д. Купер.* Периодический закон. М., «Мир», 1965.
5. *А. А. Макареня.* Д. И. Менделеев о радиоактивности и сложности элементов. Л., «Знание», 1969.
6. *Б. М. Кедров.* Закон периодичности и химические элементы. М., «Наука», 1969.
7. *Д. Н. Трифонов.* Структура и границы периодической системы М., Атомиздат, 1969.
8. Периодический закон и строение атома. М., Атомиздат, 1971.
9. 100 лет периодического закона химических элементов. 1869—1969. М., «Наука», 1971.
10. *В. И. Семишин.* Периодическая система химических элементов Д. И. Менделеева. М., «Химия», 1972.
11. *В. М. Клечковский.* Распределение атомных электронов и правило последовательного заполнения $(n + l)$-групп. М., Атомиздат, 1968.
12. *E. Lisitzin.* Über der Ionisierungsspannungen der Elemente in verschiedenen Ionisierungszustanden.— Soc. scient. Fennica. Comment. phys. math. Helsingfors, 1938, H. 4.
13. *М. М. Протодьяконов.* Свойства и электронное строение породообразующих минералов. М., «Наука», 1969.
14. *И. П. Селинов.* Изотопы, т. III. М., «Наука», 1970.
15. *М. Гепперт-Майер, И. Г. Д. Иенсен.* Элементарная теория ядерных оболочек. ИЛ, 1958.

Глава 2

СТРОЕНИЕ И СИММЕТРИЯ ЯДЕР АТОМОВ

Теория ядра — одна из наиболее разработанных областей современной физики. Литература по результатам экспериментальных и теоретических исследований ядер весьма велика. Так, только в работе И. П. Селинова [1] список литературы по данному вопросу занимает свыше 200 страниц. Поэтому дать сколько-нибудь подробный разбор работ в этой книге не представляется возможным. Мы приведем только краткий перечень основных результатов, полученных многочисленными учеными, необходимых для дальнейшего изложения.

Ядра атомов состоят из протонов p и нейтронов n, рассматриваемых как единая система «нуклон». Основные параметры протона и нейтрона приведены в первом разделе работы. Почему нейтрон, не имеющий электрического заряда, обладает магнитным моментом, до ТФП было неизвестно.

Нуклоны связаны между собой близкодействующими ядерными силами (сильное взаимодействие). Природа этих сил оставалась еще далеко не выясненной. В первом разделе показано, что эти трудности преодолимы в рамках новой единой теории.

Заряды ядер атомов соответствуют номерам Z по таблице Менделеева. Вместе с ростом зарядов ядер растут и их массовые числа A. В начале таблицы Менделеева число нейтронов в ядре примерно равняется числу протонов, а к концу периодической системы числа нейтронов нарастают быстрее, чем числа протонов. Для описания этого факта предложен ряд эмпирических формул (например, Камерона). Однако отклонения от них получаются большими [2, 3]. Наиболее резкие отклонения (рис. 1, *а*) от плавной кривой возникают для магических чисел нейтронов и протонов: 2, 8, 20, 28, 50, 82, 126, 184 [1—7 и др.]. В зависимости от четного (Ч) или нечетного (Н) числа протонов и нейтронов различают ядра ЧЧ, ЧН, НЧ и НН. Наиболее устойчивыми обычно являются четно-четные ядра. Почему, во многом неясно.

Для каждого заряда ядра (атомного номера) имеется ряд изотопов с различными массовыми числами A. Для нечетных зарядов обычно существует только один устойчивый изотоп, а для четных — несколько. К концу таблицы элементов число изотопов возрастает. Причины такого чередования также неясны. Реальные элементы обычно представляют собой смесь различных количеств изотопов.

Для каждого массового числа A существует ряд изобар с различными зарядами ядер Z. К концу таблицы Менделеева число вариантов изобар возрастает. Ядра с одинаковым числом нейтронов называют изонейтронными или изотонами. Известна также изомерия ядер, т. е. различие их свойств при неизменных значениях Z и A.

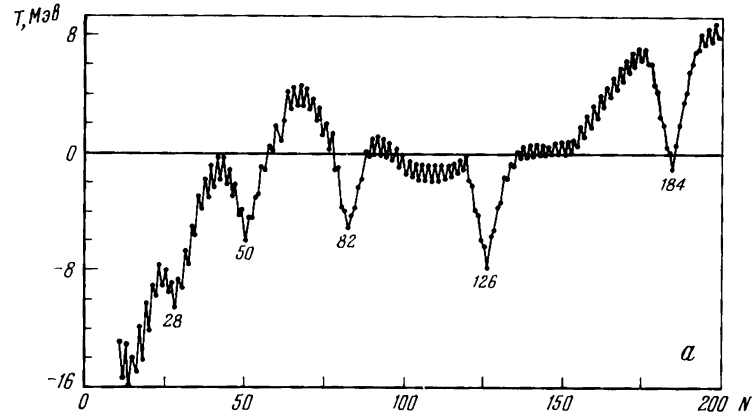
Из опыта установлены величины их масс и дефекты масс, а по ним вычислены энергии связи ядер, как полные E, так и удельные —средние, приходящиеся на один нуклон, E/A. Средние энергии связи достигают своего максимума для элементов середины таблицы Менделеева (см. рис. 1, *б*).

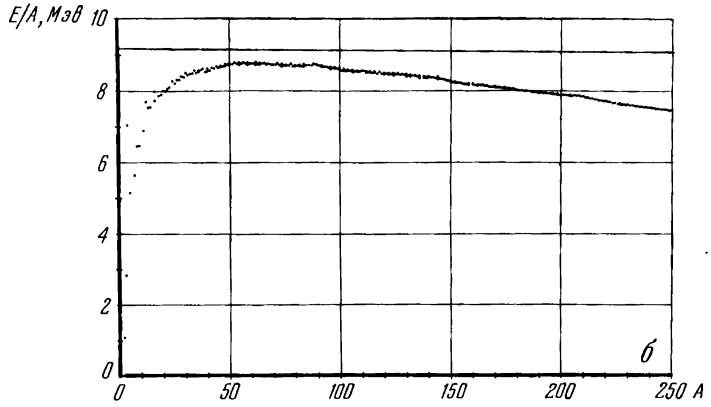
У некоторых ядер наблюдается α- и β-распад, сопровождающийся выделением α-частиц, β-частиц (электроны) и γ-квантов. Сейчас считается, что электроны в ядрах отсутствуют и возникают только при превращении нейтронов в протоны. При «захвате» электронов ядрами они увеличивают в них число нейтронов, а сами как бы исчезают бесследно. Времена полураспада для различных изотопов различаются на много порядков. Для элементов, встречающихся в природе и обладающих зарядами Z, равными 43, 61, 85 и 87, стабильные изотопы отсутствуют. Особенно много радиоактивных изотопов имеется в конце периодической таблицы элементов.

При бомбардировке ядер протонами, нейтронами, дейтронами, α-частицами или другими ядрами возникают ядерные реакции, в результате которых может происходить деление и синтез новых ядер.

И. П. Селинов [1, 4] считает, что легкие ядра до O^{16} образуются одно из другого путем присоединения дейтрона d. Все 2β-устойчивые ядра после O^{16} строятся путем чередования одинаковых пар: $2p$- или $2n$-нуклонов. Все 2β-устойчивые ядра образуются путем чередования гелиогрупп двух типов: α^4 $(2p2n)$ и α^6 $(2p4n)$. В ядрах существует единая система протонных Z и нейтронных N уровней с нуклонными оболочками, завершающимися на ядрах с магическими числами нейтронов. Однако полная система чередования масс как устойчивых, так и неустойчивых ядер еще не разработана.

Радиусы ядер возрастают приблизительно пропорционально кубическому корню из числа нуклонов $A^{1/3}$, т. е. плотность всех ядер примерно одинакова. Она мало меняется по радиусу и только к периферии ядра постепенно уменьшается. Ядра считаются сферически симметричными, некоторые





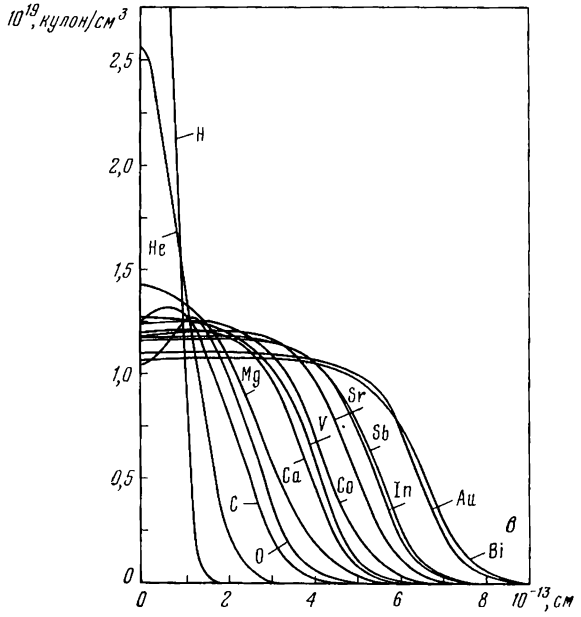


Рис. 1. Некоторые характеристики ядер

а — поправка к формуле Камерона в зависимости от числа нейтронов;

б — средняя энергия связи на нуклон у 2β-устойчивых ядер;

в — опытное распределение плотности заряда ядра по радиусу

тяжелые ядра полагают деформированными в двухосные и трехосные эллипсоиды (см. рис. 1, *в*).

С возрастанием атомных номеров Z и массовых чисел ядер A их механические и магнитные моменты периодически изменяются. Закономерности этих чередований для всех изотопов изучены недостаточно.

Существует несколько моделей для описания строения ядер: капельная, оболочечная, статистическая, оптическая, обобщенная и др. Каждая из моделей характеризует часть свойств ядер. Само обилие моделей свидетельствует о незавершенности исследований вопроса о строении ядер.

Более подробные сведения о строении и свойствах ядер можно найти в многочисленной литературе, например, в [1—7 и др.]

Таким образом, наряду с весьма значительными достижениями науки о строении ядер ряд принципиальных вопросов теории ядер еще ждет своего решения. К этим вопросам относятся в первую очередь такие: а) до сих пор дискутируется природа ядерных сил. Мезонная теория этих сил при всей ее привлекательности не позволяет получить достаточно хороший способ их расчета; б) отсутствует законченное и однозначное представление о структуре ядер; в) совершенно открыт вопрос о том, существует ли связь между структурами ядер и атомных электронных оболочек.

В данной работе необходимо обратить внимание на то, что в рамках теории фундаментального поля имеется большая дополнительная информация о свойствах составляющих ядро элементарных частиц, использование которой может облегчить разрешение некоторых затруднений, еще оставшихся в теории ядра. При этом мы, естественно, не можем претендовать на разрешение всех таких затруднений и на законченность рассмотренных здесь вопросов.

Для дальнейшего нам потребуются некоторые сведения о результатах экспериментов. Возьмем данные из работы И. П. Селинова [1]. Отложим на оси абсцисс массовые числа A, а по оси ординат — удельные энергии связи E/A на один нуклон для всех изотопов (для примера на рис. 2 приведена только небольшая часть такой диаграммы). Соединим точки для изотопов плавными кривыми. Кривые получаются парными: одна из них проходит через четные, а другая — через нечетные значения A. В каждой паре сверху лежит кривая для одинаковой четности чисел протонов и нейтронов ЧЧ или НН. Кривые для разной четности протонов и нейтронов ЧН и НЧ лежат ниже. Пары кривых для четных изотопов (Z — четное) в целом лежат относительно выше, а для расположенных между ними нечетных изотопов (Z — нечетное) — ниже. Поэтому энергетически выгоднее, а соответственно и вероятнее образование нескольких четных и одного или малого числа нечетных изотопов, что и наблюдается в действительности. В большинстве случаев наиболее устойчивые и распространенные изотопы лежат ближе всего к максимуму соответствующих кривых.

Таким образом, казалось бы, что максимум удельной энергии связи между нуклонами E/A — основная причина устойчивости и распространенности изотопов. Однако эта закономерность не является абсолютной. Так, удельная энергия связи для Be^8, Be^{10} получается выше, чем для Be^9. Но именно последний изотоп более распространен, чем предыдущие, так как изотоп Be^8 распадается на две α-частицы в момент своего образования. Отсюда следует, что кроме средней удельной энергии связи E/A на устойчивость и распространенность ядер должен влиять еще какой-то другой, достаточно сильный фактор, например форма ядер и их симметрия. Этот фактор не был до сих пор

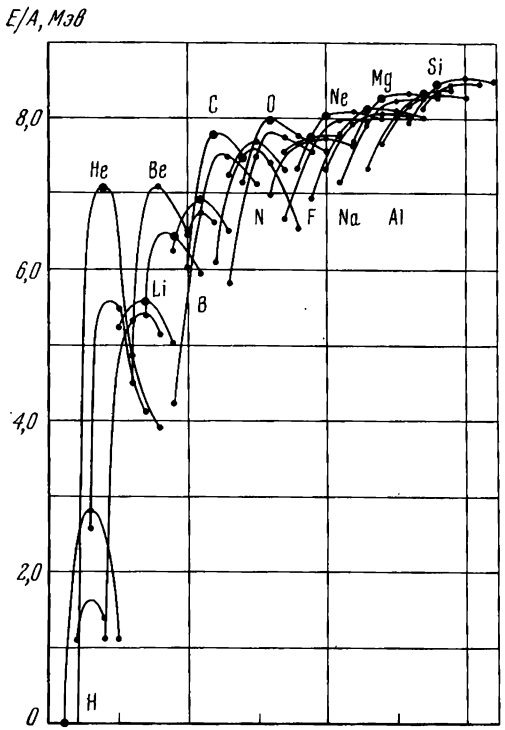


Рис. 2. Зависимость удельной энергии связи E/A от массового числа A

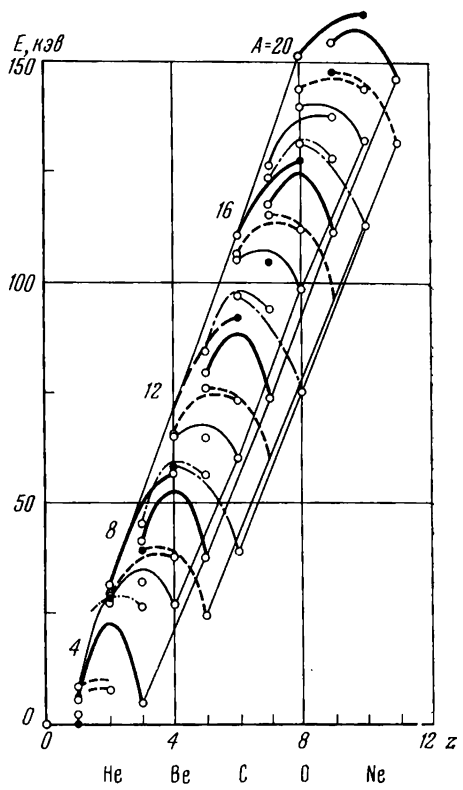


Рис. 3. Зависимость энергии связи E от атомного номера Z

установлен. У ядра Be^8 разные связи могут быть неравноценными. Каждая четверка нуклонов может быть прочно связана внутри себя, но между четверками возможна значительно более слабая связь. Тогда средняя энергия связи для Be^8 получится большой, и в то же время это ядро будет относительно легко распадаться на две α-частицы. Кроме того, повышенная распространенность какого-либо изотопа может быть вызвана тем, что его количество будет пополняться в природе путем распада изотопов других ядер.

На рис. 3 по оси абсцисс отложены атомные номера элементов Z, а по оси ординат — полные энергии связей между нуклонами E, взятые из справочника И. П. Селинова [1]. Обозначения на этом рисунке те же, что и на рис. 2. Соединим точки для изобар (A = const) плавными кривыми. Кривые имеют максимум и являются парными. Наиболее распространенные и устойчивые изотопы лежат в непосредственной близости к максимуму кривых, т. е. устойчивость ядер опять оказывается зависящей от энергии связи между нуклонами. (В данном случае максимум средней удельной энергии связи на один нуклон E/A будет располагаться в том же месте, что и максимум общей энергии связи E, так как для каждой изобары знаменатель постоянен.) При этом становится более наглядным, что наличие максимума удельной

энергии связи в данном случае обусловлено уже не числом нуклонов, ибо оно постоянно, а пространственным расположением в ядре нуклонов.

На рис. 3 каждая из двух линий изобары проведена всего через две точки, но по условию эквидистантности парных кривых ее квадратное уравнение может быть вычислено. Если продолжить аналогичные построения для более тяжелых ядер, то каждую изобару можно провести через большее число точек. В этом случае появляется возможность найти уравнения таких кривых в виде полиномов. Для этого целесообразно использовать метод последовательных разностей, согласно которому сначала вычисляются первые разности Δ_1 между смежными значениями энергий связи нуклонов на каждой кривой, затем определяются вторые разности Δ_2 между смежными значениями первых разностей и т. д. В зависимости от того, какого порядка разности становятся постоянными, кривой такого же порядка можно описать последовательность энергий связи для изотопов или изобар.

Мы провели эти расчеты и обнаружили, что, несмотря на высокую точность исходных данных для энергий связи нуклонов E, достигнуть постоянства каких-либо разностей не удается. А это может означать, по-видимому, только то, что указанные зависимости энергий связи для изотопов и изобар не могут быть описаны едиными, непрерывными уравнениями. Одной из наиболее вероятных причин этого может быть такое построение структуры ядер, при котором добавление к ядру протонов и нейтронов каждый раз скачком меняет вид его симметрии.

Все парные изобары на рис. 3 объединяются в четыре группы. Если соединить аналогичные точки изобар каждой такой группы, то получатся почти прямые линии, идущие приблизительно параллельным пучком. Переход от точки к точке при этом будет соответствовать добавлению к ядру α-частицы. Вычисляя разности энергий между смежными точками аналогичных изобар, определим энергии присоединения к ядру или отрыва от него α-частицы. При переходе от одних ядер к другим они колеблются без ясно выраженной закономерности. То же самое получается и при вычислении энергий присоединения или отрыва пар протонов или нейтронов. Это обстоятельство также свидетельствует в пользу представления о скачкообразном изменении вида симметрии и свойств ядер при присоединении к ним или отрыве от них нуклонов.

Существование изомеров ядер показывает, что даже при неизменном Z и A могут проявляться разные свойства ядер, что может быть вызвано только различием в их пространственном строении.

Как известно, в капельной модели ядра дискретное его строение из конечного числа нуклонов не учитывается. В оболочечной модели рассматривается деление ядра на сферически-симметричные оболочки, завершающиеся для магических чисел нуклонов, но вопрос об угловой симметрии ядер и этих оболочек обычно опускается.

Оказалось, что многое проясняется, если рассмотреть новую структуру ядер в соответствии с ТФП. Она опирается на открытую в ТФП анизотропию элементарных частиц, о которой уже было упомянуто в первом разделе книги. Вычислим здесь некоторые дополнительные значения для этого свойства элементарных частиц. Расчет носит оценочный характер.

Уже из электродинамики известно, что напряженность электрического поля заряда, движущегося со скоростью $\beta = v/c$, определяется по формуле

$$|E| = \frac{q}{r^2} \frac{1-\beta^2}{(1-\beta^2 \sin^2\delta)^{3/2}}, \qquad (1)$$

где q — электрический заряд; r — расстояние от центра заряда; δ — угол между направлением скорости $\vec{\beta}$ и прямой из центра заряда в точку наблюдения. (В первом разделе этот угол обозначен через θ.) Первый сферически-симметричный член q/r^2 в этой формуле соответствует закону Кулона, а второй множитель характеризует собой деформацию поля, вызванную релятивистскими эффектами. Симметрия поля — осевая относительно скорости β.

Напряженность поля является минимальной в направлении скорости β; когда $\delta = 0$

$$E_{\min} = \frac{q}{r^2}(1 - \beta^2).$$

При $\delta = \pi/2$ напряженность поля достигает максимума

$$E_{\max} = \frac{q}{r^2}\frac{1}{(1-\beta^2)^{1/2}}.$$

Отношение этих величин представляет собой максимальное значение анизотропии поля

$$\frac{E_{\max}}{E_{\min}} = \frac{1}{(1-\beta^2)^{3/2}}.$$

При движении с ультрарелятивистскими скоростями величина β очень мало отличается от единицы, и потому степень деформации получается весьма большой. Так, при $\beta^2 = 0{,}9976$ эта величина превышает 11 000. Чем ближе β к единице, тем выше степень деформации поля.

Изложенное относится к обычной электродинамике. В ТФП (см. I раздел) уравнение (1) применимо и для поля вращающихся во втором подпространстве субчастиц, но с заменой кулонова потенциала на потенциал ТФП.

$$\varphi = \frac{q}{r}e^{-R/r}.$$

Если расстояние r окажется на порядок больше радиуса элементарной частицы R, то созданный ею электрический потенциал практически не будет отличаться от кулоновского. Это позволит использовать первый сомножитель в формуле (1) для расчетов и в пределах атомного ядра, где $R \ll r$.

Если напряженность электрического поля вокруг медленно движущегося заряда сферически-симметрична, то в ультрарелятивистском случае эта сфера превращается в тонкий «диск», перпендикулярный к вектору скорости $\vec{\beta}$. Такие диски всех субчастиц пересекаются на мгновенной оси вращения элементарной частицы. Поэтому суммарное поле элементарной частицы будет максимальным на мгновенной оси ее вращения и минимальным — в плоскости ее вращения. Форма поля будет иметь вид тонкой «иглы», проходящей через центр элементарной частицы и перпендикулярной к плоскости ее вращения.

Угол δ в формуле (1) отсчитывается от направления скорости β. Но при вращении каждой субчастицы оно непрерывно меняется в плоскости, перпендикулярной к оси. Поэтому удобнее вести отсчет углов от мгновенной оси вращения элементарной частицы.

Разместим начало координат в центре частицы. Ось $0Z_1$ направим по ее мгновенной оси вращения, а оси $0X_1$ и $0Y_1$ — произвольно в плоскости вращения элементарной частицы. Проведем в координатной плоскости $X_1 0 Y_1$

из начала координат произвольную прямую $0A$ под углом $\bar{\gamma}_1$ к оси $0Z_1$. Направляющие косинусы для нее следующие

$$\cos\alpha_1 = \sin\bar{\gamma}_1,$$

$$\cos\beta_1 = 0,$$

$$\cos\gamma_1 = \cos\bar{\gamma}_1.$$

Направляющие косинусы для вектора скорости субчастицы $\vec{\beta}$ будут такими:

$$\cos\alpha_2 = \sin\psi,$$

$$\cos\beta_2 = \cos\psi,$$

$$\cos\gamma_2 = 0,$$

где ψ — угол поворота субчастицы от принятой плоскости отсчета $X_1 0 Z_1$. Как известно из аналитической геометрии, угол между двумя направлениями $0A$ и β получится равным

$$\cos\delta = \cos\alpha_1\cos\alpha_2 + \cos\beta_1\cos\beta_2 + \cos\gamma_1\cos\gamma_2 = \sin\gamma_1\sin\psi.$$

Подставляя в (1), найдем

$$E = \frac{q}{r^2}\cdot\frac{1-\beta^2}{[1-\beta^2(1-\sin^2\gamma_1\sin^2\psi)]^{3/2}}. \qquad (2)$$

В момент, когда субчастица пересекает плоскость отсчета $X_1 0_1 Z_1$, угол $\psi = 0$. При этом независимо от значения угла γ_1 напряженность поля достигает своего максимального значения

$$E_{\max} = \frac{q}{r^2}\frac{1}{(1-\beta^2)^{1/2}}.$$

При повороте субчастицы на 90° напряженность поля падает до минимума

$$E_{\min} = \frac{q}{r^2}\frac{1-\beta^2}{(1-\beta^2\cos^2\gamma_1)^{3/2}}.$$

Как видим, минимальное значение в свою очередь зависит от угла γ_1. На оси вращения $0_1 Z_1$ $\gamma_1 = 0$, отсюда

$$E_{\min}\big|_{\gamma_1=0} = \frac{q}{r^2}\frac{1}{(1-\beta^2)^{1/2}} = E_{\max}.$$

Таким образом, здесь напряженность поля не меняется при вращении субчастицы и $E_{\min} = E_{\max}$. Но в плоскости вращения частицы $\gamma_1 = \pi/2$, отсюда

$$E_{\min}\Big|_{\gamma_1=\frac{\pi}{2}} = \frac{q}{r^2}(1-\beta^2).$$

Расчет для протона показывает, что напряженность поля от одной субчастицы падает вдвое при условии, когда $\sin\gamma_1\sin\psi = 0{,}036989$. Это соответствует углу поворота $\psi = 2°07'$. Следовательно, в плоскости вращения частицы напряженность поля резко возрастает при пересечении субчастицей плоскости отсчета $X_1 0 Z_1$ и затем быстро падает до минимального значения. Однако субчастиц на окружности частицы весьма много, например, для про-

тона их число (во втором подпространстве) $n = 5912$, что соответствует углу между ними менее 4′.

Пики напряженности поля от смежных субчастиц сильно перекрываются один другим во времени. Как показано в первой части книги, волновая составляющая от двух токовых колец компенсируется путем интерференции и остается только постоянная слагающая напряженности поля.

На мгновенной оси вращения ЭЧ напряженности полей от всех субчастиц складываются, поэтому напряженность поля здесь максимальная

$$E_{\max} = \frac{q}{r^2} \frac{1}{(1-\beta^2)^{1/2}}.$$

Статическая составляющая напряженности поля меняется обратно пропорционально синусу угла с осью вращения ЭЧ

$$E = \frac{q}{r^2} \frac{1}{(1-\beta^2)^{1/2}} \frac{1}{n \sin \gamma_1}. \tag{3}$$

Минимальное значение для синуса угла γ_1 равно $\sin \gamma_0 \approx 1/n$.

Линию максимального поля вдоль оси вращения частицы нельзя считать бесконечно тонкой.

Минимальная напряженность поля имеет место в плоскости вращения частицы при $\gamma_1 = \pi/2$

$$E_{\min} = \frac{q}{r^2} \frac{1}{(1-\beta^2)^{1/2}} \frac{1}{n}.$$

Таким образом, минимальная напряженность поля в плоскости вращения частицы будет в n раз меньше чем на ее оси.

Чтобы учесть влияние прецессии на анизотропию поля элементарной частицы, необходимо, не выходя за рамки второго подпространства, перейти к новой системе координат. Начало ее по-прежнему поместим в центре частицы, ось $0Z$ направляем по оси прецессии, а оси $0X$ и $0Y$ — перпендикулярно к ней в произвольном направлении. Угол между мгновенной осью вращения частицы 0_1Z_1 и осью прецессии $0Z$ обозначим γ, а угол поворота мгновенной оси вращения частицы в плане при прецессии—через φ. Тогда направляющие косинусы для оси 0_1Z_1 в новой системе координат окажутся равными

$$\cos \alpha = \sin \gamma \cos \varphi,$$

$$\cos \beta = \sin \gamma \sin \varphi,$$

$$\cos \gamma = \cos \gamma.$$

Не нарушая общности анализа, расчетное направление можно разместить в координатной плоскости $X0Z$. Направляющие косинусы при этом будут следующими:

$$\cos \alpha_3 = \sin \gamma_3,$$

$$\cos \beta_3 = 0,$$

$$\cos \gamma_3 = \cos \gamma_3.$$

Тогда косинус угла между расчетным направлением $0A$ и мгновенной осью вращения частицы 0_1Z_1

$$\cos \gamma_1 = \sin \gamma \cos \varphi \sin \gamma_3 + \cos \gamma \cos \gamma_3.$$

Таблица 10

Расчет анизотропии прецессирующей частицы

Угол	Экватор	Конус прецессии	Ось прецессии
γ_3	$\pi/2$	γ	0 или π
Множитель при E_{max}	$\frac{1}{n\sqrt{1-\sin^2\gamma\cos^2\varphi}}$	$\frac{1}{n\sqrt{1-(\sin^2\gamma\cos\varphi+\cos^2\gamma)^2}}$	$\frac{1}{n\sin\gamma}$
$\varphi=0$	$\frac{1}{n\cos\gamma}$	1/1	$\frac{1}{n\sin\gamma}$
$\varphi=\pi/2$	$1/n$	$\frac{1}{n\sqrt{1-\cos^4\gamma}}$	$\frac{1}{n\sin\gamma}$
$\varphi=\pi$	$\frac{1}{n\cos\gamma}$	$\frac{1}{n\sin 2\gamma}$	$\frac{1}{n\sin\gamma}$

Отсюда

$$E=\frac{q}{r^2}\frac{1}{(1-\beta^2)^{1/2}}\frac{1}{n\sqrt{1-(\sin\gamma\cos\varphi\sin\gamma_3+\cos\gamma\cos\gamma_3)^2}}. \qquad (4)$$

Проанализируем уравнение (4) при некоторых характерных значениях входящих в него углов γ_3 и φ. Полученные значения коэффициентов пропорциональности при E_{max} сведем в табл. 10.

Для примера приведем численные данные для протона. Как определено в ТФП, для него $\beta^2=0{,}997676$; $n=5912$; $\sin\gamma=0{,}299744$. Откуда $1/(1-\beta^2)^{1/2}=20{,}7$ и $\gamma=17°27'$.

Таким образом, максимальная напряженность электрического поля

$$E_{max}=20{,}7\,\frac{q}{r^2}.$$

Из-за анизотропии максимальная напряженность поля оказывается почти в 21 раз больше, чем вычисленная по обычной формуле Кулона. Численные значения коэффициентов при E_{max} и q/r^2 для различных γ_3 и φ для протона приведены в табл. 11.

Таблица 11

Расчетные коэффициенты анизотропии для протона

Угол	Экватор	Конус прецессии	Ось прецессии
γ_3	$\pi/2$	$\gamma=17°27'$	0 или π
$\varphi=0$	$\frac{1}{5640}$; 0,0037	1/1; 20,75	$\frac{1}{1770}$; 0,0117
$\varphi=\pi/2$	$\frac{1}{5910}$; 0,0035	$\frac{1}{2450}$; 0,0085	$\frac{1}{1770}$; 0,0117
$\varphi=\pi$	$\frac{1}{5640}$; 0,0037	$\frac{1}{3380}$; 0,0061	$\frac{1}{1770}$; 0,0117

Из табл. 10 и 11 видно следующее.

1. Максимального значения напряженность электрического поля достигает на поверхности конуса прецессии ($\gamma_3 = \gamma$). При этом коэффициент пропорциональности при E_{max} колеблется от 1/1 до 1/3380, т. е. изменяется в 3380 раз за один оборот прецессии. Он получается примерно то в 21 раз больше, то в 62 раза меньше, чем по Кулону.

2. Самая низкая напряженность электрического поля имеет место в экваториальной плоскости прецессирующей частицы, т. е. в плоскости, проходящей через ее центр перпендикулярно к оси прецессии. Здесь напряженность поля меньше максимума в 5640—5910 раз и в 272—285 раз меньше, чем по Кулону. Тут напряженность поля изменяется в узких пределах — всего на 5%.

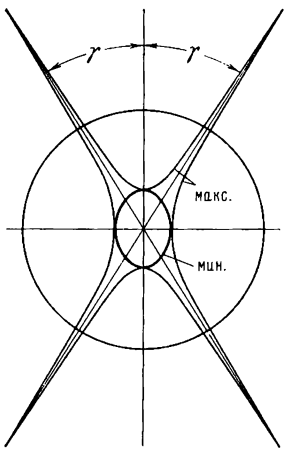


Рис. 4. Полярная диаграмма анизотропии частицы

3. Промежуточный минимум напряженности поля существует на оси прецессии частицы. Он постоянен и меньше максимума (для протона) в 1770 раз, т. е. в 85 раз меньше, чем по Кулону. Таким образом, этот минимум примерно втрое менее глубок, чем на экваторе частицы.

На рис. 4 изображена полярная диаграмма анизотропии прецессирующего протона. Ввиду очень большого диапазона изменения величин напряженностей поля пришлось по радиусам отложить не сами значения коэффициентов, а величины, пропорциональные корню четвертой степени из них. Окружность на диаграмме соответствует обычной формуле Кулона, когда коэффициент пропорциональности при q/r^2 равняется единице. Для максимумов напряженности поля получается фигура, напоминающая по форме комбинацию двухполого и однополого гиперболоидов, вписанных в два конуса с общей вершиной в центре протона. Для минимумов — фигура имеет вид деформированного трехосного эллипсоида. За каждый оборот прецессии частицы напряженность поля меняется от минимальной до максимальной.

Из-за того, что на рис. 4 отложены корни четвертой степени из коэффициентов анизотропии, общая картина анизотропии поля получилась сильно смягченной. Фактически же она имеет значительно более острый вид и приближенно может быть сведена к поверхности конусов анизотропии.

Картина анизотропии электрического поля электрона аналогична рис. 4, но угол прецессии увеличивается до 22°18′ и разница между максимумом и минимумом резко возрастает. Так, согласно [8, 9], для электрона скорость β значительно ближе к единице, чем для протона ($1 - \beta = 3{,}167 \cdot 10^{-10}$ и $n = 4{,}436 \cdot 10^{13}$). Произведя вычисления, получим, что пиковое значение поля для электрона превышает кулоновское более чем в $39 \cdot 10^3$ раз, а минимальное — получается в $1{,}1 \cdot 10^{10}$ раз меньше, чем по Кулону. Это значит, что для электрона напряженность поля чрезвычайно велика на поверхности конуса прецессии в момент, когда мгновенная ось вращения электрона пересекает пробную частицу, и практически падает до нуля в других направлениях.

Согласно ТФП, нейтрон является составной, а не элементарной частицей. Основа нейтрона — протон. Он соединен с метастабильной отрицательной частицей, которую мы дальше будем именовать «метон», чтобы подчеркнуть

различия между метастабильным и виртуальным состояниями в ТФП, отсутствующие в других теориях.

Под метастабильным состоянием в ТФП подразумевается структура, в которой дискретные круговые токи вырождаются в сплошные круговые токи. Метон является состоянием безразличного равновесия и может сохраняться только при наличии внешних сил, удерживающих систему в метастабильном состоянии. Чтобы это оказалось возможным, метон должен иметь соответствующие размеры и находиться от протона на расстоянии, при котором энергия их взаимодействия будет максимальной. Как было показано в первом разделе, минимуму энергии системы из двух частиц, в которой одна (протон) является доминирующей, соответствует для устойчивых круговых орбит метрика, у которой $g_{00} = 2/3$. Это соответствует расстоянию от центра протона $r = 3R$. В данном случае энергия связи имеет порядок $(1 - \sqrt{8/9}) \cdot m_p c^2$, численное значение энергии будет равно примерно 60 *Мэв*. С учетом анизотропии характер взаимодействия изменится. Расстояние между взаимодействующими частицами возрастет, а энергия связи уменьшится.

Учет анизотропии повлияет и на указанную оценку энергии связи при устойчивых орбитах. Особенность метастабильного состояния в ТФП состоит в том, что спонтанно возникают силы, стремящиеся вернуть частицу в нормальное состояние. Метон, «сжатый» протоном по радиусу на три порядка (отношение радиусов электрона и протона), стремится увеличить свой радиус.

Поскольку силы, расширяющие метон, и силы, удерживающие его у протона, очень близки по величине, одиночная система протон — метон не может быть устойчивой. Указанная энергия связи протон — метон компенсируется энергией раздвижения внутри метонного кольца, в котором одноименные заряды стремятся увеличить его размер.

Описанная система представляет собой явно то, что мы сейчас называем нейтроном. При отсутствии внешних сил метон медленно, но неуклонно будет отходить от протона, постепенно увеличиваясь в размере, пока не достигнет радиуса электрона и не перейдет из метастабильного состояния в устойчивое. Взаимодействие одного протона с метоном является слабым и обладает той уникальной особенностью, что близость действующих сил делает процесс чрезвычайно замедленным.

В том случае, когда один метон окажется на пересечении конусов анизотропии двух соосно расположенных протонов (рис. 5, *б*), силы воздействия протонов удвоятся, а сила, стремящаяся расширить кольцо метона, останется прежней. В такой системе возникнет сильное взаимодействие. Понятно, что система из двух протонов и одного метона может быть устойчивой до тех пор, пока сохраняется разность фаз в положении максимумов поля на конусах анизотропии у обоих протонов.

Конечно, если один метон окажется на пересечении конусов анизотропии более чем двух протонов, то связь такой системы будет еще более прочной. Однако легко видеть, что полная синхронизация максимумов и, следовательно, наибольшая связь системы, составленной из метонов и протонов, будет иметь место для системы, состоящей из четырех протонов и двух метонов. Покажем, что такие взаимодействия могут быть ответственными за формирование ядер атомов, образующих при этом «кристаллическую» модель.

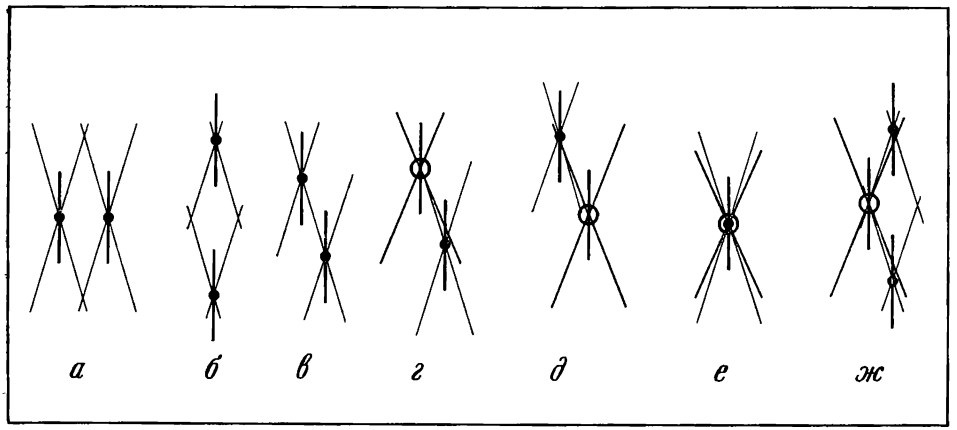


Рис. 5. Схемы взаимодействия частиц

а — одноименные параллельные; *б* — одноименные соосные; *в* — одноименные по образующей конуса; *г* и *д* — разноименные — по образующей конуса; *е* — нейтрон; *ж* — дейтрон

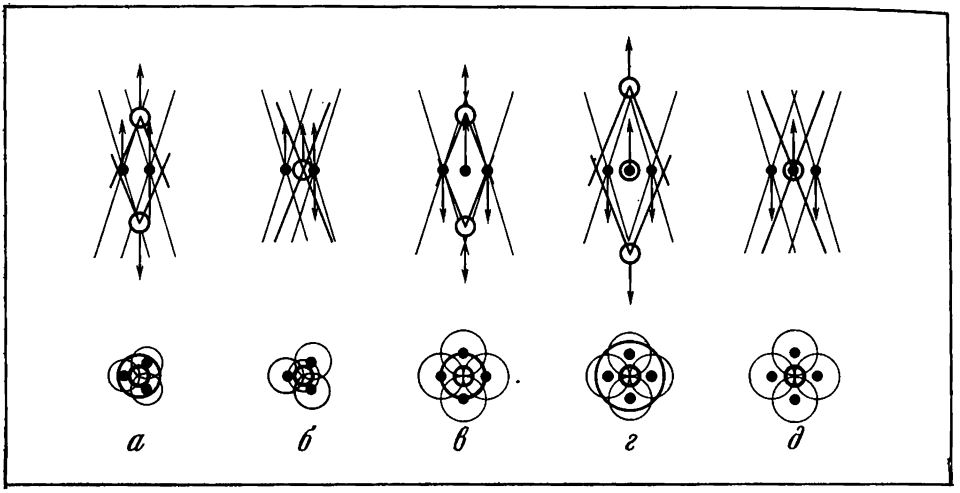


Рис. 6. Схемы строения простейших ядер по «кристаллической модели»

а — тритий; *б* — гелий He^3; *в* — гелий He^4; *г* — водород H^4; *д* — литий Li^4

В отдельном нейтроне центры протона и метона совпадут (см. рис. 5, *е*). Такая комбинированная частица обладает весьма необычным полем. Внутри протонного конуса анизотропии будет преобладать положительная, а снаружи метонного конуса — отрицательная напряженность поля. Между обоими конусами она меняет знак и проходит через нуль. В то же время из-за равенства противоположных по знаку зарядов протона и метона общий заряд нейтрона будет равен нулю.

Ввиду весьма малой массы метона по сравнению с массой протона масса нейтрона должна только на малые доли процента превышать массу протона. ТФП дает для массы протона $1{,}67252 \cdot 10^{-24}$ *г*, а для нейтрона — $1{,}67482 \cdot 10^{-24}$ *г*, или на 0,1355% больше. Разница между опытными значениями этих

масс в ядерных единицах массы 1,00727661 и 1,0086652 тоже составляет на 0,1355% больше для нейтрона, как и в ТФП.

При сближении нейтрона и внешнего протона последний притянет к себе метон из нейтрона. Поэтому дейтрон можно представить не как протон и нейтрон, а как два протона и обобществленный между ними метон. Протоны при этом расположатся соосно один другому, и отталкивание их будет минимальным. Максимальная напряженность положительного поля возникнет на окружности пересечения их конусов анизотропии в плоскости, проходящей посредине между двумя протонами перпендикулярно к общей оси их конусов. В дальнейшем мы используем только термины «протон» и «метон».

По условиям симметрии метон должен бы лежать в средней точке между протонами. Но тогда разноименные заряды не попадут на противоположные конусы анизотропии и система окажется недостаточно устойчивой. Если же метон попадет на пересечение протонных конусов анизотропии, то сила связи существенно возрастет. Одновременно у него должен появиться орбитальный момент. Ось метонного конуса анизотропии будет параллельна общей оси протонов. Тогда оба протона окажутся довольно близко к поверхности метонного конуса анизотропии. Центр масс двух протонов не совпадет с центром метона, т. е. ядро получится асимметричным. Поэтому удельная энергия связи для дейтрона будет небольшой, хотя и достаточной для его устойчивости. Из опыта она получается равной всего 1112 *кэв*.

При прецессии обоих протонов в одну сторону их механические моменты сложатся. Из-за весьма малой массы метон вклада в этот механический момент практически не внесет. При рассмотрении вопроса о спине ЭЧ, входящих в систему, следует учитывать также и то, что спин протона и метона равен $^1/_2$ только в сумме.

Для дейтрона механический момент равен единице.

Описанная схема не является статической. При прецессии каждый из протонов периодически будет притягивать метон к себе. Метон же, прецессируя, также поочередно периодически будет притягивать к себе каждый из протонов. С учетом орбитального движения все составные части дейтрона будут непрерывно осциллировать относительно точек, отмеченных на рис. 5, *ж*.

Ядро трития состоит из одного протона и двух нейтронов. Рассуждая аналогично предыдущему, получим, что его следует рассматривать как три протона и два метона. Минимальное отталкивание между тремя протонами будет в случае, когда их экваториальные плоскости совпадут, центры расположатся по углам равностороннего треугольника и оси конусов прецессии будут параллельными. Тогда для каждой пары конусов возникнут гиперболические линии пересечения между ними. Эти линии пересекутся в двух точках (над и под центром этого треугольника), в которых напряженность протонного поля будет максимальной. Именно туда будут стремиться два метона (рис. 6, *а*). Они расположатся соосно. Их общая ось прецессии пройдет параллельно осям прецессии протонов через центр составляемого ими треугольника. Тогда все три протона попадут внутрь окружности пересечения метонных конусов анизотропии достаточно близко к ним. Это приведет к повышению прочности ядра трития. Действительно, если в дейтроне удельная энергия связи на нуклон составляет 1112 *кэв*, то для трития она увеличится до 2827 *кэв*, т. е. примерно в 2,5 раза.

Для сравнения рассмотрим ядро He^3. Оно, так же как и ядро трития, содержит три протона, но зато только один связующий метон. По условиям

симметрии метон должен бы попасть в центр треугольника из протонов. И хотя он будет расположен ближе к центрам протонов, чем в тритии, но попадет в точку минимальной напряженности протонных полей, а протоны окажутся в минимуме напряженности метонного поля. Вероятнее всего, метон будет колебаться вдоль оси симметрии ядра He^3 от одной точки пересечения протонных конусов к другой. Симметрия ядра будет носить статистический характер. Поэтому удельная энергия связи для He^3 должна быть меньше, чем для трития. Опыт показывает, что она составляет 2573 *кэв*, т. е. 0,9 от энергии трития.

Для обоих ядер H^3 и He^3 два спина окажутся антипараллельными и потому не дадут вклада в суммарный механический момент, а спин третьего протона, куда бы он ни был направлен, не будет скомпенсирован, и потому оба ядра должны иметь механический момент, равный $^1/_2$, что и наблюдается экспериментально.

Структуру ядра He^4 можно представить как четыре находящихся в одной плоскости протона, центры которых занимают углы квадрата. Оси конусов анизотропии у них расположатся перпендикулярно к данной плоскости и параллельно одна другой (рис. 6, *в*). Тогда протонные конусы прецессии, пересекаясь, дадут две точки максимума протонного поля над и под центром квадрата, куда, вероятнее всего, и будут стремиться два наличных метона. Их оси конусов анизотропии расположатся соосно и будут проходить через центр протонного квадрата. При этом все четыре протона попадут на пересечение двух метонных конусов анизотропии.

Между строением ядра трития H^3 и гелия He^4 есть некоторая аналогия. Оба ядра имеют вид дипирамиды, но для трития она тригональная, а для гелия — тетрагональная. В обоих случаях в вершинах дипирамид размещаются метоны. Очевидно, что 4 протона ядра гелия сильнее притягивают к себе эти метоны, чем 3 протона трития. Следует ожидать, что расстояние между метонами у гелия получится меньше, чем у трития. Поэтому в ядре трития метоны попадут точно на пересечение протонных конусов, а в ядре гелия протоны окажутся точно на пересечении метонных конусов, у которых угол прецессии больше, чем у протонов. Но степень анизотропии поля у метонов выше. Поэтому тетрагональная конфигурация ядра гелия должна быть более устойчивой, чем тригональная — трития. Действительно, для трития удельная энергия связи составляет 2827, а для He^4 — 7074 *кэв*, или в 2,5 раза больше.

У ядра He^4 направления прецессии двух протонов ориентированы в одну сторону, а у другой пары — в противоположную. Прецессии двух метонов тоже будут направлены в разные стороны. Поэтому механический и магнитный моменты α-частицы должны быть равны нулю, что и наблюдается в действительности; такие модели условно назовем кристаллическими.

Сравним теперь изобары из четырех протонов, отличные от He^4.

Для водорода H^4 число метонов равно 3 вместо 2. Третий метон может симметрично расположиться только в центре ядра. При этом он неизбежно раздвинет в стороны по оси симметрии два других крайних метона (рис. 6, *г*). Это приведет к тому, что они сместятся из точек пересечения протонных конусов наружу. Кроме того, наличие центрального метона приведет к некоторому радиальному сближению четырех протонов, а это вызовет удаление их от конусов анизотропии крайних метонов. Поскольку экваториальные плоскости четырех протонов и центрального метона совпадают, все они находятся в местах минимальной напряженности поля. Увеличение связи протонов

с центральным метоном за счет их сближения ни в коей мере не сможет компенсировать резкое падение энергии связи их с двумя другими метонами из-за взаимного удаления протонов и этих двух метонов от пересечения конусов анизотропии. Поэтому следует ожидать существенного падения энергии связи такого ядра. И действительно, добавление к ядру гелия одного метона приведет к снижению удельной энергии связи до 1395 *кэв*, т. е. в 5 раз.

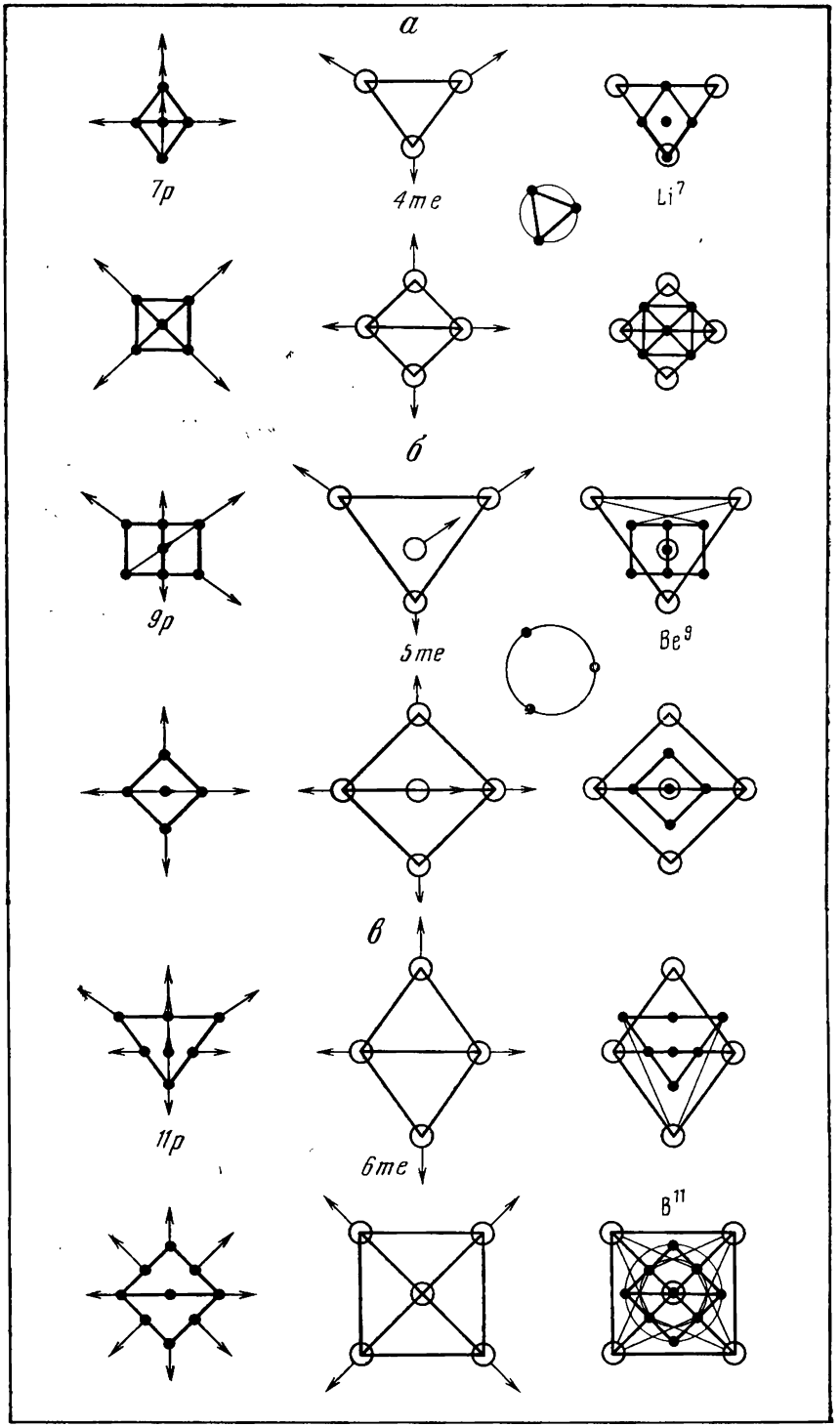
С другой стороны, ядро Li^4 имеет то же квадратное расположение протонов, что и у He^4, но вместо двух метонов остается только один. Симметрично он сможет расположиться только в центре этого квадрата из протонов. Тогда взаимодействие его с протонами происходит только в этой плоскости, где напряженности поля как у протонов, так и у метона минимальны. Вероятнее всего, метон будет колебаться вдоль оси симметрии ядра Li^4 от одной точки пересечения протонных конусов к другой. Поэтому данное ядро также должно быть много слабее гелиевого (He^4). И действительно для Li^4 опыт дает удельную энергию связи 1202 *кэв*, или в 5,9 раз меньше, чем для гелия He^4, и изотоп Li^4 часто даже не удается наблюдать. Поэтому для четырех протонов имеется оптимальная конфигурация из двух метонов, при которой энергия связи получается максимальной. Удаление или добавление одного метона в обоих случаях приводит к резкому снижению удельной энергии связи.

Подобным же образом можно проследить строение и особенности свойств ряда других изотопов и изобар. Но число их, как известно, составляет многие сотни и потому не может быть приведено в данной книге.

Рассмотрим ядро Li^7. Оно состоит из семи протонов и 4 метонов.

Поскольку в этом случае число протонов нечетное, для симметричного их расположения один из протонов должен находиться в центре ядра. Остальные 6 протонов могут быть симметрично расположены тремя способами: по углам плоского шестиугольника, тригональной призмы и октаэдра. В свою очередь, 4 метона можно симметрично разметить в виде центрированного треугольника, по углам квадрата, по углам тетраэдра или все на одной общей оси. Очевидно, что для устойчивости ядра симметрии протонных и метонных конфигураций должны соответствовать одна другой.

Анализ показывает, что наиболее симметричная, самосогласованная конфигурация ядра Li^7 получается при расположении 6 протонов по углам октаэдра (рис. 7, *а*). Их оси прецессии попарно будут проходить через центр ядра и совпадать с четверными осями симметрии октаэдра. При этом каждая такая пара будет находиться в соосном положении, где имеется минимум напряженности отталкивающего поля. Направления на другие четыре протона составляют 45° с осями анизотропии каждой пары, т. е. сильно отличаются от угла 17°27′ для конусов анизотропии. Поэтому взаимное отталкивание всех шести протонов будет умеренным. Пересечения шести протонных конусов анизотропии внутри ядра создадут точки, куда потенциально могут стремиться метоны. Но если они попадут туда, то метонные конуса анизотропии не пройдут близко от протонов, и потому такое ядро не будет достаточно устойчивым. Более вероятным является расположение всех четырех метонов несколько снаружи ядра по тройным осям симметрии октаэдра на таких расстояниях, чтобы каждые 3 протона противоположной грани октаэдра попали точно на их метонные конусы. При этом каждый протон окажется на пересечении трех метонных конусов. А так как степень анизотропии метонов существенно выше, чем протонов, то такая конфигурация ядра (рис. 7, *а*) должна быть наиболее устойчивой. При этом удельная энергия связи


а
7p
4me
Li7
б
9p
5me
Be9
в
11p
6me
B11

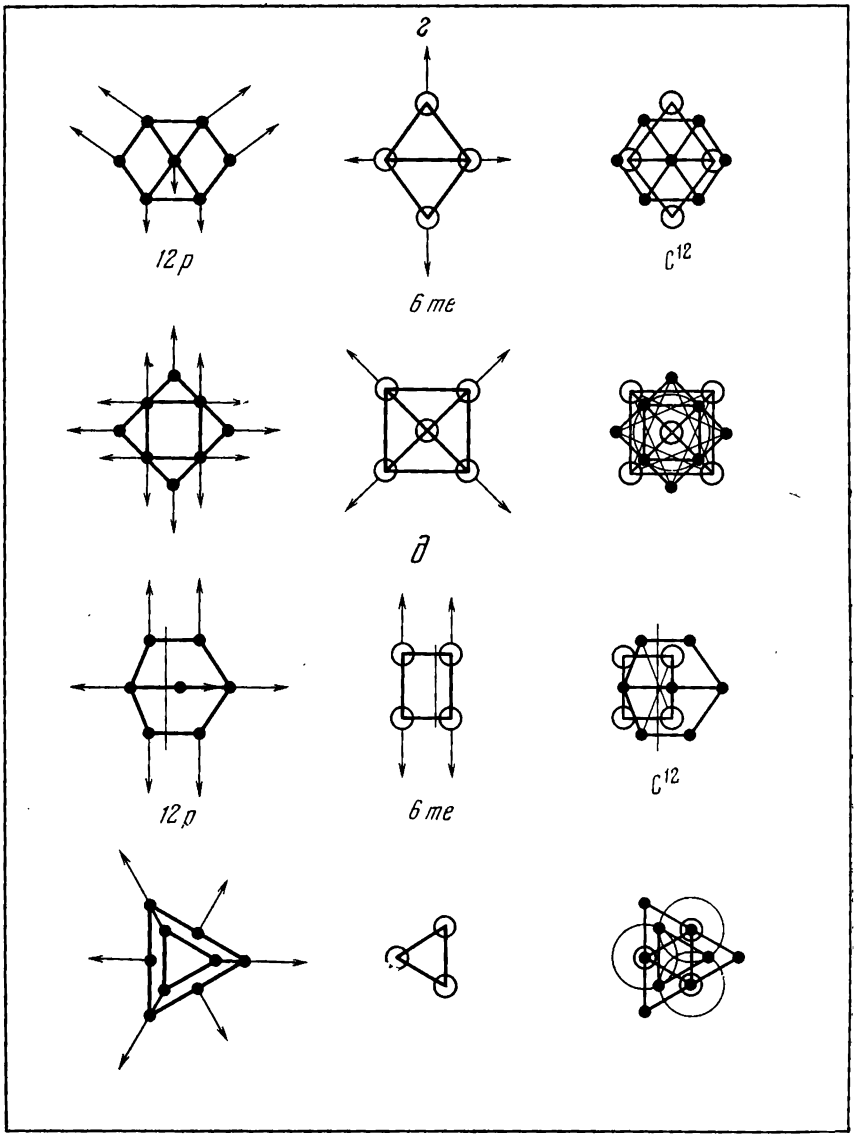


Рис. 7. Схемы строения ядер

а — литий Li^7; *б* — бериллий Be^9; *в* — бор B^{11}; *г* — углерод (кубический) C^{12}; *д* — углерод (гексагональный) C^{12}

получается повышенной и равной 5607 *кэв*, или около 0,9 от удельной энергии α-частицы.

Центральный протон находится в состоянии безразличного равновесия, так как остальные протоны и метоны располагаются вокруг него симметрично и силы от них уравновешиваются. Ориентировка оси симметрии его конуса прецессии может быть либо по одной из протонных (четверных осей симметрии октаэдра), либо по одной из метонных осей прецессии (тройных осей симметрии октаэдра). Для всех наружных протонов и метонов (если не учитывать влияния центрального протона) механические и магнитные моменты должны быть попарно антипараллельны. Если ось анизотропии центрального протона окажется направленной по одной из осей конусов наружных протонов, то получится, что на этой оси два момента будут направлены в одну и ту же сторону, а один — в противоположную. Совместное действие двух моментов вынудит третий момент повернуться в ту же сторону. Поэтому суммарный момент для Li^7 должен быть $^3/_2$, что и наблюдается в действительности.

Необходимо иметь в виду, что если под действием внешних полей ось анизотропии среднего протона повернется по тройной оси симметрии ядра, то все прочие моменты ядра Li^7 уравновесятся и его суммарный момент будет равен $^1/_2$.

Ядро Be^9 состоит из 9 протонов и 5 метонов. Девять протонов можно симметрично расположить по углам и в центре куба, двух тетраэдров, гексагональной дипирамиды и по углам и в средней плоскости тригональной призмы. Соответственно 5 метонов можно симметрично разместить по углам и в центре тетраэдра, квадрата, по углам тригональной дипирамиды и все пять — на одной оси. Наиболее устойчивая конфигурация получается при комбинации объемно-центрированного протонного куба и центрированного метонного тетраэдра. Тогда четыре наружных протона попадут на пересечение трех метонных конусов каждый, а четыре остальных протона — невдалеке от других четырех точек пересечения метонных конусов. Кроме того, каждая пара соосных протонов окажется на одной оси с конусом прецессии одного из метонов (см. рис. 7, *б*). В то же время ни один из конусов анизотропии не пройдет близко к центрам одноименных частиц. Точки пересечения протонных конусов метонами заняты не будут. Так как степень метонной анизотропии выше, чем протонной, то такая конфигурация получается достаточно устойчивой. И действительно ядро Be^9 получается устойчивым, и опытное значение для него удельной энергии связи составит 7463 *кэв*, т. е. несколько больше 0,9 от энергии связи весьма устойчивой α-частицы.

В центре ядра окажутся один протон и один метон, которые образуют нераспавшийся нейтрон. Это приведет к некоторому увеличению размеров ядра, но не сможет нарушить угловые зависимости внутри него. Ось прецессии этого нейтрона может совпадать с осью прецессии любой пары протонов и одного метона. Тогда направление прецессии всех трех протонов (включая протон, входящий в центральный нейтрон) будет одинаковым, что приведет к суммарному механическому моменту $^3/_2$. Все остальные 6 протонных моментов попарно уравновесятся. Опыт дает именно такое значение момента ядра Be^9.

Проводя аналогичные построения, получим для ряда ядер элементов следующие результаты.

Для B^{11} протонная конфигурация представляет собой объемно-центрированный тетраэдр с ребром из трех протонов, а метонная — обычный октаэдр (см. рис. 7, *в*).

У углерода C^{12} возможны две протонные конфигурации: кубооктаэдр и усеченная тригональная дипирамида. Соответствующие метонные конфигурации образуют октаэдр и тригональную призму (см. рис. 7, *г*, *д*).

В ядре азота N^{14} протоны располагаются, как в гранецентрированном кубе, а метоны — в виде объемно-центрированного октаэдра (см. рис. 8, *а*).

Для кислорода O^{16} протоны образуют гранецентрированный усеченный тетраэдр (лавесовский полиэдр), а метоны — сдвоенный тетраэдр (см. рис. 8, *б*).

У фтора F^{19} протоны дают объемно-центрированный октаэдр с ребром из трех протонов, а метоны — комбинацию октаэдра и тетраэдра (см. рис. 8, *в*).

В ядре неона Ne^{20} протоны образуют тетраэдр с ребром из четырех протонов, а метоны — октаэдр, вписанный в тетраэдр (см. рис. 8, *г*). В этом ядре ближе всего к центру располагаются 4 протона, центрирующие грани полиэдра, чуть дальше — 12 протонов, образующих этот полиэдр в виде усеченного тетраэдра, и еще дальше — 4 протона против центров треугольных граней этого полиэдра. Если отнести эти числа протонов к квадрату расстояния их до центра ядра, пропорционального поверхности сферы, на которой помещаются протоны, то получится закономерность распределения плотности ядра по радиусу. Соединив эти точки плавной кривой (рис. 9), получим картину, подобную эмпирической картине плотности ядер, показанной на рис. 1, *в*.

На всех приведенных схемах протоны обозначены черными, а метоны — белыми кружками. Для ясности некоторые конфигурации показаны в разных проекциях. Вероятные направления осей конусов анизотропии указаны стрелками. Для полностью симметричных (четно-четных) ядер геометрическая сумма механических моментов получается равной нулю, что совпадает с опытными данными.

Для четно-нечетных или нечетно-четных ядер в их центре оказывается протон или метон, момент которого не может быть скомпенсирован моментом любой другой частицы. Нескомпенсированный момент будет направлен параллельно моменту некоторых соосных с ним частиц. Тогда их совместное действие может вызвать переориентировку антипараллельных ему моментов, что приведет к появлению механических моментов, бо́льших $^1/_2$.

В настоящее время обычно при расчете магнитных моментов ядер ссылаются на одночастичную модель Шмидта, однако она дает весьма большую разницу между вычисленными и замеренными значениями [7].

Возьмем данные из таблиц И. П. Селинова [1] и построим диаграмму (рис. 10). По оси абсцисс отложим числа протонов, а по оси ординат — числа метонов. В каждой клеточке отметим значение механического момента, кратного $^1/_2$. Там, где данных нет, поставим прочерки. Кроме того, более жирными линиями выделим 2β- и β-устойчивые изотопы, а наиболее распространенные нуклиды обведем еще кружком. Вертикальные столбцы — это изобары; каждая клеточка изобары отличается от другой числом метонов, т. е. соответствует β-переходу. Каждая строка будет отвечать изометонам (изонейтронам — изотонам). Внутри строки изменяется общее число протонов. Изотопы каждого элемента при этом попадут на прямые линии, наклоненные под углом 45° к осям координат. На рис. 10 для примера показана только начальная часть такой диаграммы, так как вся диаграмма слишком длинна.

Анализируя диаграмму, необходимо заметить следующее.

Для ядер с четными числами протонов и метонов все механические моменты равны нулю.

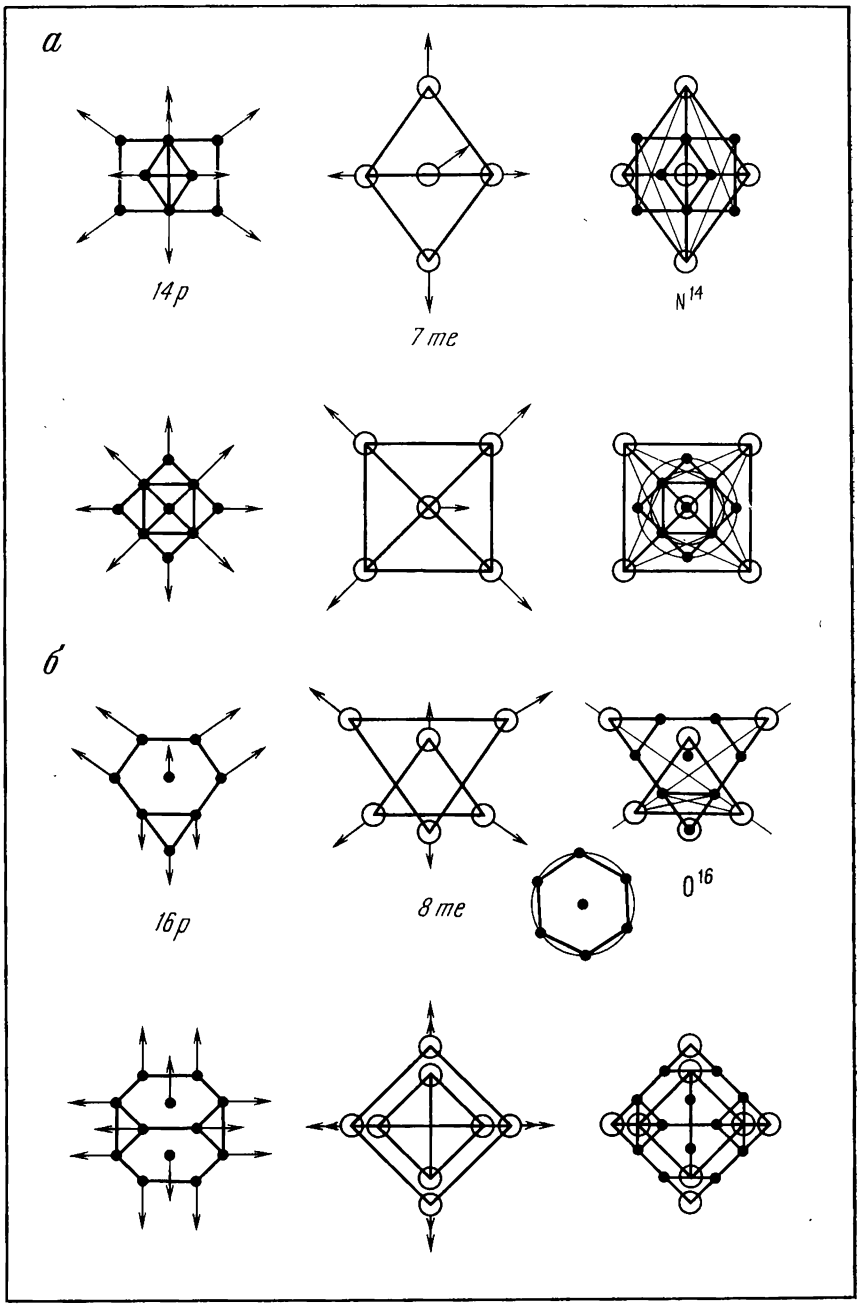


Рис. 8. Схемы строения ядер

а — азот N^{14}; *б* — кислород O^{16};

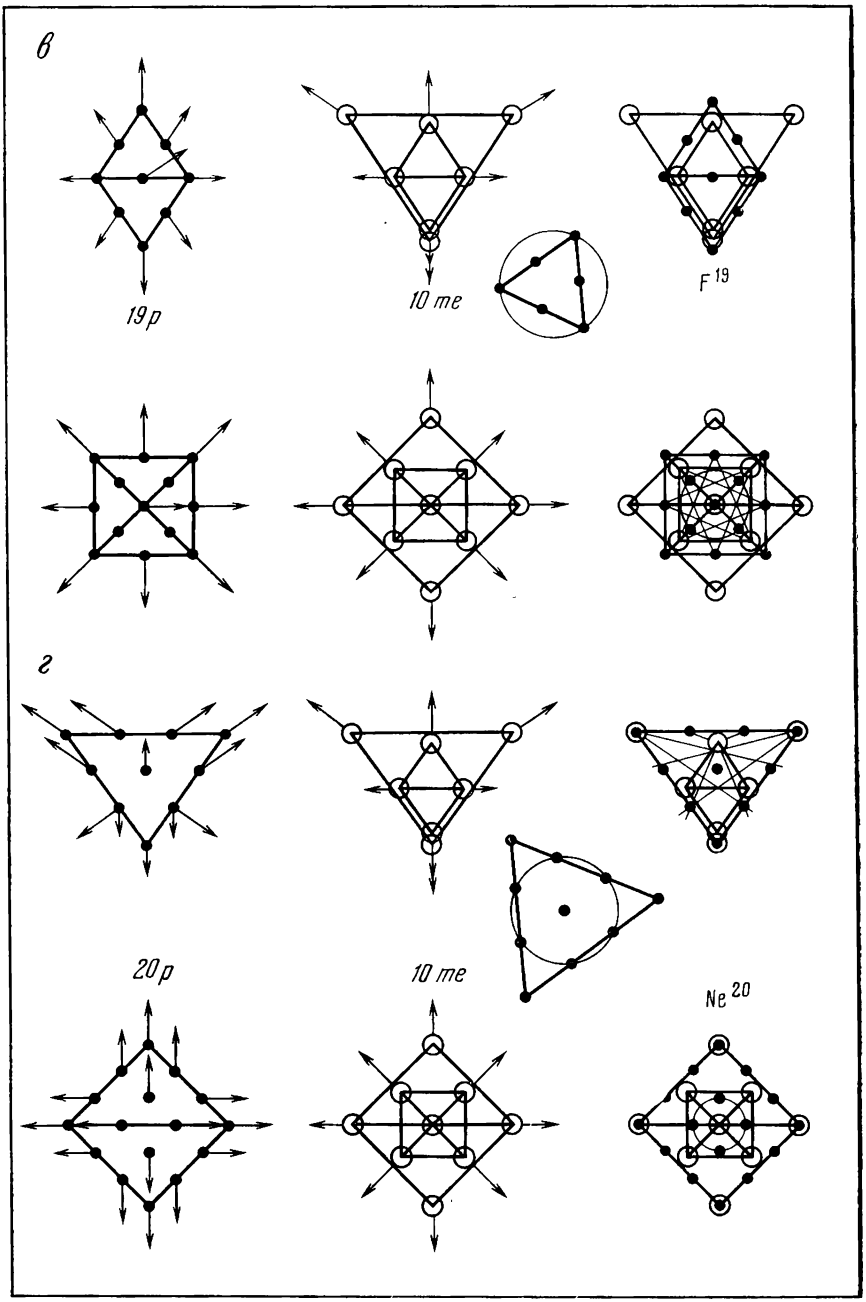


Рис. 8. (окончание)

в — фтор F^{19}; *г* — неон Ne^{20};

Для четного числа протонов все изобары имеют четные механические моменты, а для нечетных изобар и моменты получаются нечетные.

Для всех четных изометонов чередуются нулевые и нечетные моменты; для нечетных — четные и нечетные.

Если к ядрам с нулевыми моментами добавить α-частицу (четыре протона и два метона), которая также обладает нулевым моментом, то и суммарный момент остается нулевым. Однако при добавлении α-частицы к любому другому ядру результаты получаются самые разнообразные, моменты увеличиваются, остаются неизменными или уменьшаются. Таким образом, здесь аддитивности не наблюдается. Следовательно, знание только числа протонов и нейтронов (или протонов и метонов) недостаточно для определения моментов ядер. Необходимо еще знать их симметрию и ориентировку одного момента относительно другого.

Одночастичная модель Шмидта не может объяснить, почему одна частица в сферически симметричном поле остальных частиц с суммарным нулевым моментом может давать моменты с большой кратностью.

В работе Ш. Кука [7] приведена диаграмма расчетных моментов для нечетного числа нейтронов (в этой модели) и указано, что для небольшого их числа количество правильных предсказаний превышает число ошибоч-

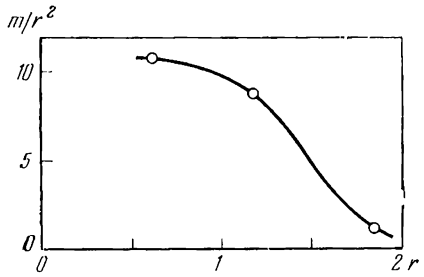
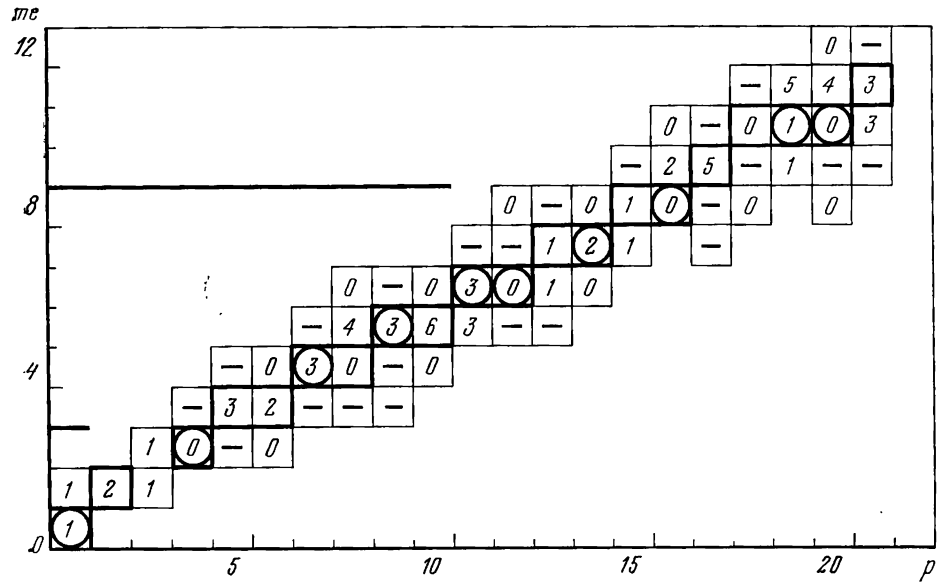


Рис. 9. Расчетное распределение плотности ядра неона Ne^{20} по радиусу

Рис. 10. Чередование механических моментов ядер в зависимости от числа протонов p и метонов me



ных, а для большого числа нейтронов, наоборот, значительно больше ошибок. Но в этой работе для каждого числа нейтронов дан только один расчетный момент, а из приведенных на рис. 10 опытных данных, собранных И. П. Селиновым, видно, что одному и тому же числу метонов могут соответствовать несколько разных моментов, поэтому число ошибочных предсказаний для одночастичной модели еще больше увеличивается.

Следует ожидать, что для правильного определения моментов целесообразно индивидуально определять строение и симметрию каждого из ядер.

Анализируя все изложенное в этой главе, необходимо отметить следующее.

1. Элементарные частицы обладают резкой анизотропией электрического поля и прецессией. Напряженность их поля во втором подпространстве определяется формулой (4). Она достигает максимума на поверхности конуса прецессии и минимума — в перпендикулярной к нему плоскости симметрии и на самой оси прецессии. Степень анизотропии очень велика (см. табл. 10 и 11). Для электрона она много выше, чем для протона. Угол прецессии для протона составляет 17°27′, а для электрона — 22°18′. Напряженность поля осциллирует особенно сильно на поверхности конуса прецессии.

2. Нейтрон представляет собой составную частицу. Он состоит из доминирующего стабильного протона и метастабильной отрицательной частицы метона несколько большего размера. Метон нейтрализует электрический заряд протона, почти не меняет общей массы и механического момента, а суммарный магнитный момент изменяет знак и величину. В отдельности нейтрон не стабилен. При распаде метон резко увеличивается в размерах, превращается в стабильный электрон и порождает антинейтрино.

3. Одноименно заряженная пара частиц, вступая во взаимодействия на близких расстояниях, образует наиболее устойчивые конфигурации в местах минимума напряженности полей друг друга, т. е. в одной плоскости или соосно. Разноименно заряженные частицы ядер сильнее взаимодействуют в случае попадания на поверхность конуса анизотропии частицы противоположного знака. Сильные взаимодействия, их близкодействие и направленность тесно связаны с конусами анизотропии.

4. У ядер из нескольких частиц возникают максимумы напряженности полей в местах пересечения одноименных конусов анизотропии. Чем большее число частиц противоположного знака попадает в эти места, тем прочнее получается ядро. Все это приводит к возникновению пространственно-симметричных конфигураций ядер. Наиболее симметричные формы отвечают кубической сингонии. Для них весьма характерна кратность четырем (тетраэдр) и шести (октаэдр). Обе эти величины четные, в чем и кроется причина эмпирически найденной зависимости повышения устойчивости четно-четных ядер.

Целесообразно рассматривать ядра состоящими из протонов и связывающих их метонов.

5. При нечетном числе частиц одна из них обычно падает в центр ядра, что приводит к уменьшению энергии взаимодействия частиц или понижению симметрии ядра (например, до гексагональной), что также приводит к снижению энергии связи. Это обстоятельство для четно-нечетных и нечетно-четных ядер было ранее замечено экспериментаторами.

6. При добавлении к ядру нечетного числа частиц его симметрия каждый раз меняется скачком. Эта перестройка касается не только внешних оболочек ядра, но и всего ядра в целом. Именно этим объясняется невозможность

описания закономерностей чередования энергий связи ядер при изменении в них числа частиц едиными плавными зависимостями.

Для изобар протонная конфигурация может оставаться постоянной, а меняться только взаимное расположение метонов. Форма изотонов (изометонов) также может быть неизменной, а варьировать будут протоны. Для изотопов происходит одновременное изменение как протонных, так и метонных фигур. Наиболее устойчивые ядра получаются при соответствии протонных конфигураций метонным. Таких конфигураций может быть не одна, а несколько. Именно этим объясняется существование ядер-изомеров.

7. Для парных, тетраэдрических и октаэдрических расположений частиц в ядре геометрическая сумма их механических и магнитных моментов, ориентированных по осям симметрии или параллельно им, получается равной нулю. Поэтому равны нулю механические и магнитные моменты всех ядер с четным числом протонов и метонов. Этот факт хорошо известен из экспериментов.

Наличие в ядре нечетного числа частиц приводит к появлению его асимметрии, что может вызвать переориентировку моментов других частиц и появление кратных спиновых моментов.

8. Наличие сильной анизотропии частиц и их прецессии приводит к импульсному характеру их взаимодействий. Силы, действующие на каждую частицу, все время резко меняются. Это вызывает их радиальные колебания, что придает всей картине статистический характер. Указанные на рассмотренных схемах ядерных конфигураций точки представляют собой центры, относительно которых совершаются эти колебания.

9. Для рассмотренных конфигураций ядер средняя плотность их вещества по радиусу остается постоянной, а к периферии падает, что соответствует опытным данным.

10. Сходство ряда свойств протонов и нейтронов объясняется тем, что в основе их имеется одна и та же частица — протон.

Таким образом, использование теории фундаментального поля позволяет объяснить строение и ряд свойств ядер, известных из опыта, но не имевших приемлемого объяснения, и дает возможность разобраться в некоторых свойствах ядер. Такой разбор следует делать индивидуально для каждого из ядер аналогично описанным примерам.

Ниже будет показано, что симметрия ядер тесно связанна с симметрией электронных оболочек и кристаллов.

Литература

1. *И. П. Селинов.* Изотопы, т. I, II и III. М., «Наука», 1970.
2. *В. А. Кравцов.* Массы атомов и энергии связи ядер. М., Атомиздат, 1965.
3. *Б. Джелепов, Г. Драницына.* Систематика энергий β-распада. М., Изд-во АН СССР, 1960.
4. *И. П. Селинов.* Периодическая система атомных ядер. О систематике частиц. Атомы, ядра, элементарные частицы. М., Атомиздат, 1969.
5. *Ш. Кук.* Структура атомных ядер. М., Атомиздат, 1967.
6. *О. Бор, Б. Моттельсон.* Структура атомного ядра. М., «Мир», 1971.
7. *В. В. Маляров.* Основы теории атомного ядра. М., Физматгиз, 1959.
8. *И. Л. Герловин.* Некоторые вопросы систематизации элементарных частиц. ГАО АН СССР. Депонент 111-47. Л., ВИНИТИ, 1966.
9. *И. Л. Герловин.* Систематизация элементарных частиц и соображения об основах будущей теории. Препринт ИТФ — 69-53. Киев, Ин-т теорет. физики АН УССР, 1969.

Глава 3

ПЕРИОДИЧЕСКАЯ СИСТЕМА ЭЛЕМЕНТОВ МЕНДЕЛЕЕВА И ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ АТОМОВ

Заполнение электронных оболочек по водородоподобной схеме

Как известно, точное решение волнового уравнения Шредингера имеется только для одноэлектронного атома водорода и для одноэлектронных водородоподобных ионов [1]. Для многоэлектронных атомов, т. е. для большинства элементов таблицы Менделеева, точного решения этого уравнения нет. Однако в литературе широко распространено мнение, что водородоподобной схемой можно пользоваться и для многоэлектронных атомов, если принять, что каждый электрон такого атома находится в различных состояниях, отвечающих разным сочетаниям четырех квантовых чисел для одноэлектронной водородоподобной схемы.

Согласно этой схеме, заполнение электронных оболочек многоэлектронных атомов должно происходить в соответствии с монотонным ростом главного квантового числа n, равного 1, 2, 3, 4, ... и т. д. При каждом значении n заполнение оболочек должно осуществляться в порядке возрастания орбитального квантового числа l, которое может принимать все значения от 0 до $n - 1$.

Такой порядок заполнения электронных оболочек по водородоподобной схеме приведен в табл. 12. Цифры впереди символов электронных подоболочек указывают величину главного квантового числа n, а буквы соответствуют значениям орбитального квантового числа l. Цифры справа вверху — число электронов в каждой электронной оболочке. Порядок заполнения подоболочек отмечен стрелками.

Как видим, по мере роста общего числа электронов заполнение оболочек в этой таблице происходит периодически снизу вверх и слева направо.

Таблица 12

Порядок заполнения электронных оболочек по водородоподобной схеме

l	Главное квантовое число n						
	1	2	3	4	5	6	7
6	—	—	—	—	—	—	$7i^{26}$
5	—	—	—	—	—	$6h^{22}$	$7h^{22}$
4	—	—	—	—	$5g^{18}$	$6g^{18}$	$7g^{18}$
3	—	—	—	$4f^{14}$	$5f^{14}$	$6f^{14}$	$7f^{14}$
2	—	—	$3d^{10}$	$4d^{10}$	$5d^{10}$	$6d^{10}$	$7d^{10}$
1	—	$2p^6$	$3p^6$	$4p^6$	$5p^6$	$6p^6$	$7p^6$
0	$1s^2$	$2s^2$	$3s^2$	$4s^2$	$5s^2$	$6s^2$	$7s^2$
$2n^2$	2	8	18	32	50	72	98

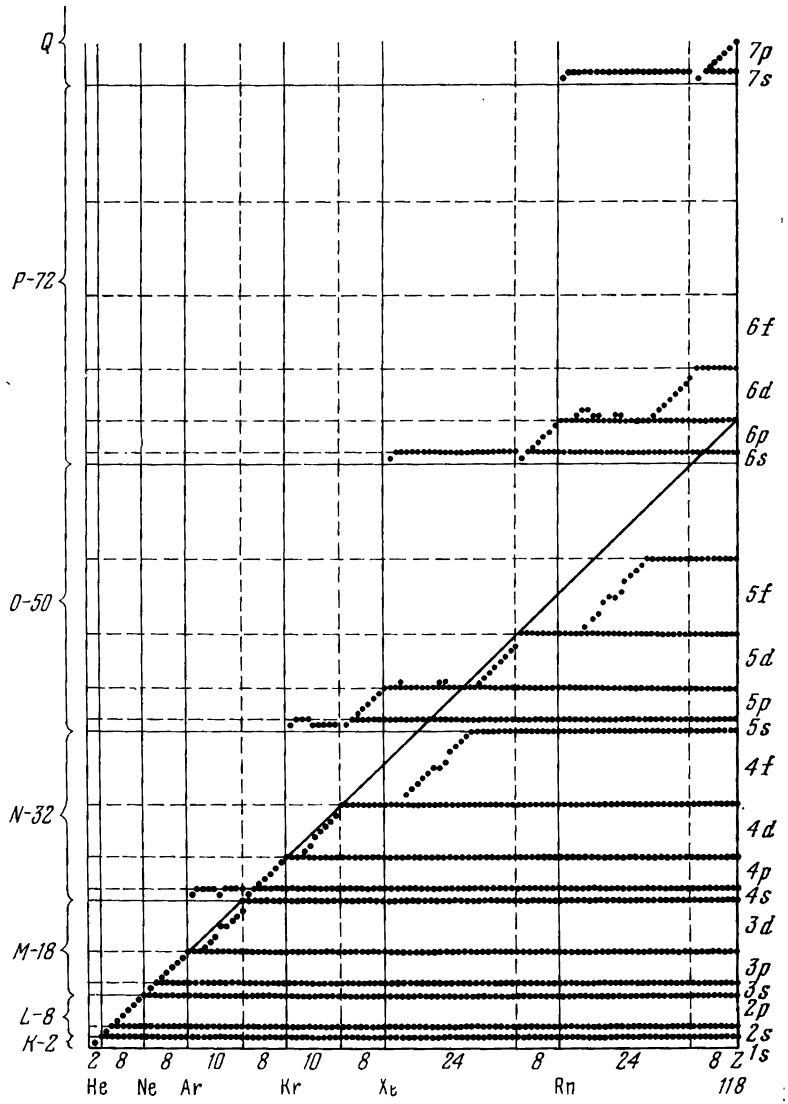


Рис. 1. Порядок заполнения электронных оболочек атомов по водородоподобной схеме

Известно, что числа элементов в периодах таблицы Менделеева соответствуют числам электронов в атомах и изменяются следующим образом: 2, 8, 8, 18, 18, 32, (32). В последней строке табл. 12 числа такие же, но повторяются они дважды, т. е. наблюдается несоответствие между периодичностью химических свойств элементов в таблице Менделеева и периодичностью заполнения электронных оболочек по «идеальной» водородоподобной схеме.

Это несоответствие становится наиболее наглядным, если его изобразить графически (рис. 1), как это было сделано в наших работах [2, 3]. На рисунке по оси абсцисс отложены атомные номера элементов таблицы Менделеева

Z, равные зарядам ядра или же суммарным числам электронов для каждого элемента. Вертикальные сплошные линии проведены на границах периодов, а пунктирные — на границах рядов таблицы Менделеева. По оси ординат отложены числа электронов по водородоподобной схеме. Горизонтальные сплошные линии проведены для полностью заполненных электронных оболочек K, L, M, N, O, P, Q, для каждого главного квантового числа n. Их символы и числа электронов показаны на рисунке слева. Пунктирные горизонтальные линии проведены в местах заполнения электронных подоболочек в соответствии со значениями орбитального квантового числа l. Их символы указаны на рисунке справа. Состояние каждого электрона изображено на координатной сетке точками. Это распределение обычно определяется спектроскопическим путем и приводится в виде таблиц символов электронов в справочниках и книгах по квантовой механике, например в [4].

При анализе рис. 1 видно, что соответствие в распределении электронов по водородоподобной схеме и атомов в таблице Менделеева отмечается только в самом начале для первых двух периодов. Дальше фактическое заполнение электронных оболочек идет со все большими перерывами и отклонениями от идеальной водородоподобной схемы.

Заполнение электронных оболочек по схеме $(n + l)$-групп. Значительно лучшее совпадение с действительностью дает распределение электронов по $(n + l)$-группам, предложенное и изученное В. М. Клечковским [5]. Им предложены следующие эмпирические правила заполнения электронных оболочек атомов (табл. 13).

1. Заполнение квантовых уровней электронами с увеличением атомного номера элемента происходит последовательно от групп уровней с меньшим значением суммы главного и орбитального квантовых чисел $(n + l)$ к группам уровней с бо́льшим значением этой суммы.

2. В пределах каждой $(n + l)$-группы заполнение уровней происходит последовательно от подгрупп с меньшим значением главного квантового числа n и бо́льшим значением l к подгруппам уровней с бо́льшим значением n и меньшим l.

Таблица 13

Порядок заполнения электронных оболочек по $(n + l)$-группам В. М. Клечковского

l	$(n+l)$									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
4	–	–	–	–	–	–	–	–	$5g^{18}$	$6g^{18}$
3	–	–	–	–	–	–	$4f^{14}$	$5f^{14}$	$6f^{14}$	$7f^{14}$
2	–	–	–	–	$3d^{10}$	$4d^{10}$	$5d^{10}$	$6d^{10}$	$7d^{10}$	$8d^{10}$
1	–	–	$2p^6$	$3p^6$	$4p^6$	$5p^6$	$6p^6$	$7p^6$	$8p^6$	$9p^6$
0	$1s^2$	$2s^2$	$3s^2$	$4s^2$	$5s^2$	$6s^2$	$7s^2$	$8s^2$	$9s^2$	$10s^2$
N_{n+l}^{max}	2	2	8	8	18	18	32	32	50	50

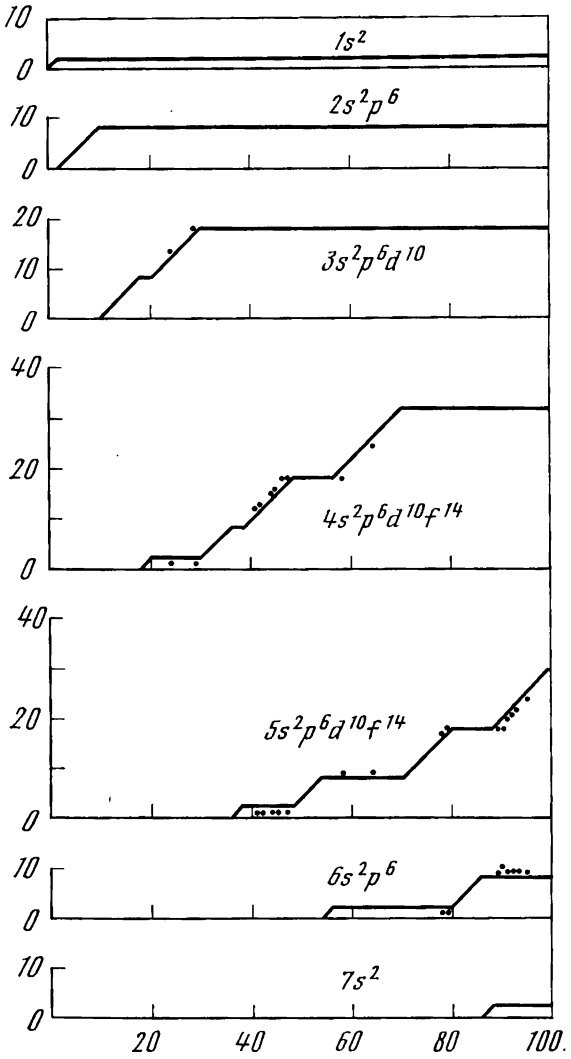


Рис. 2. Схема заполнения электронных оболочек атомов по В. М. Клечковскому

Как видим, по мере роста общего числа электронов заполнение оболочек в этой таблице происходит периодически сверху вниз и слева направо. Сравнивая табл. 12 и 13, заметим, что порядок заполнения подоболочек по величине азимутального квантового числа l у них прямо противоположный.

Суммарные числа электронов в $(n + l)$-группах повторяются по два раза (см. табл. 13). В таблице Менделеева эти повторения встречаются везде, кроме самого начала. Цифра 2 не повторяется. Поэтому периодизация электронных оболочек по $(n + l)$-группам получается сдвинутой относительно периодизации таблицы Менделеева на 2 электрона или на 2 элемента начиная со второго периода и дальше.

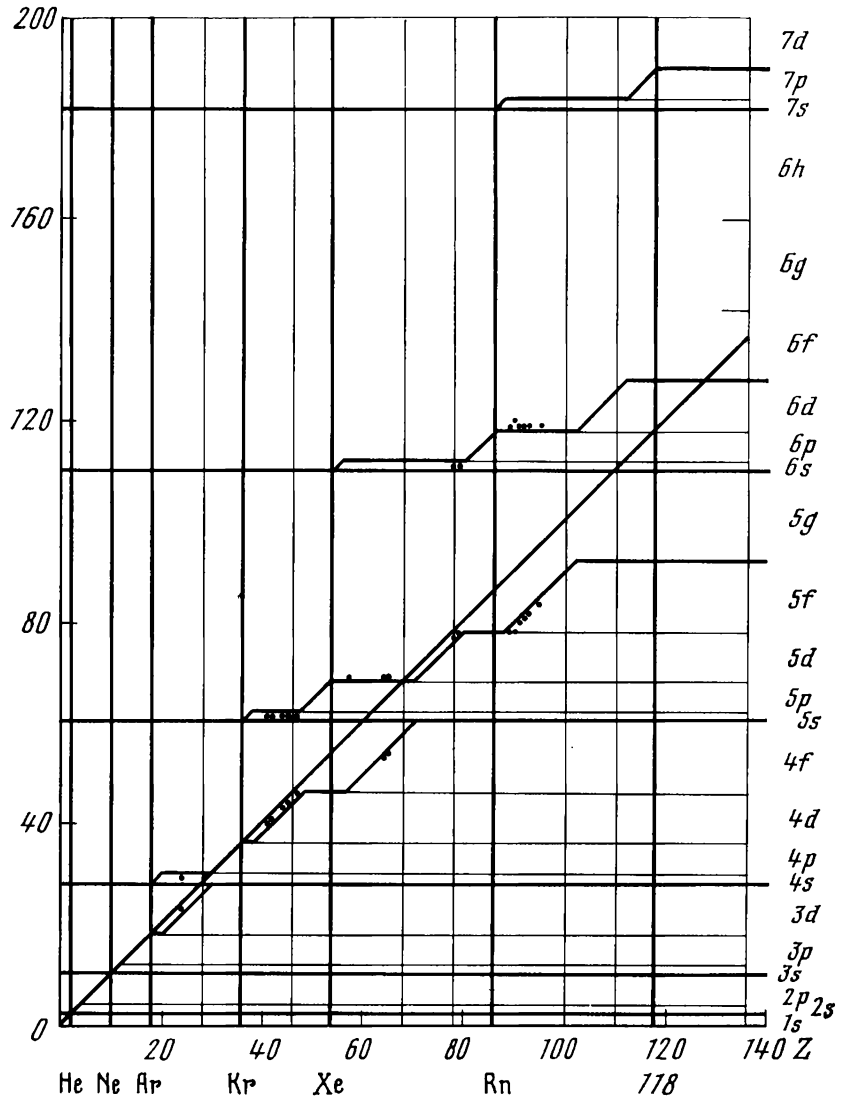


Рис. 3. Суммарная схема заполнения электронных оболочек атомов по $(n + l)$-группам

Максимальное число электронов в каждой $(n + l)$-группе, по В. М. Клечковскому, равняется

$$N_{n+l}^{\max} = {}^1/_2 [n + l + \sin^2 {}^1/_2 \pi (n + l)]^2.$$

Пользуясь приведенными правилами заполнения $(n + l)$-групп, В. М. Клечковский получил формулы для определения числа электронов N_n, заполняющих оболочки с одинаковыми значениями главного квантового числа n (рис. 2). Точками показаны различия между вычисленными и эмпирическими значениями N_n. Как видим, отклонения еще существуют,

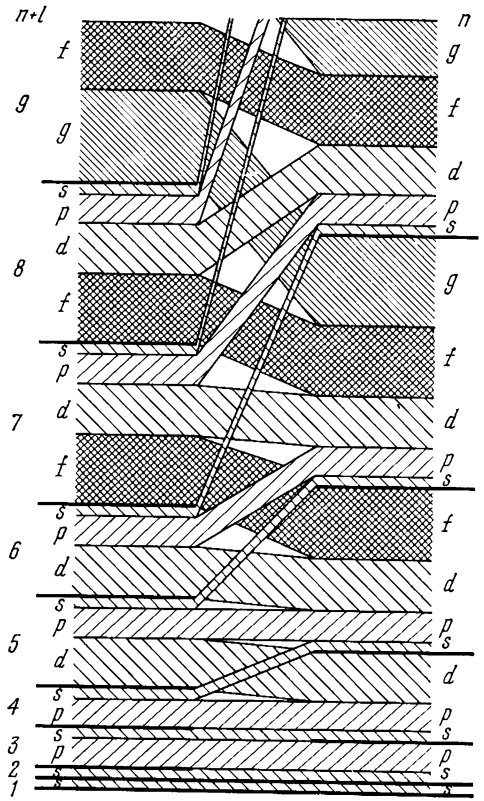


Рис. 4. Сопоставление заполнения электронных оболочек по водородоподобной схеме и по $(n + l)$-группам

Рис. 5. Предлагаемая схема заполнения электронных оболочек атомов

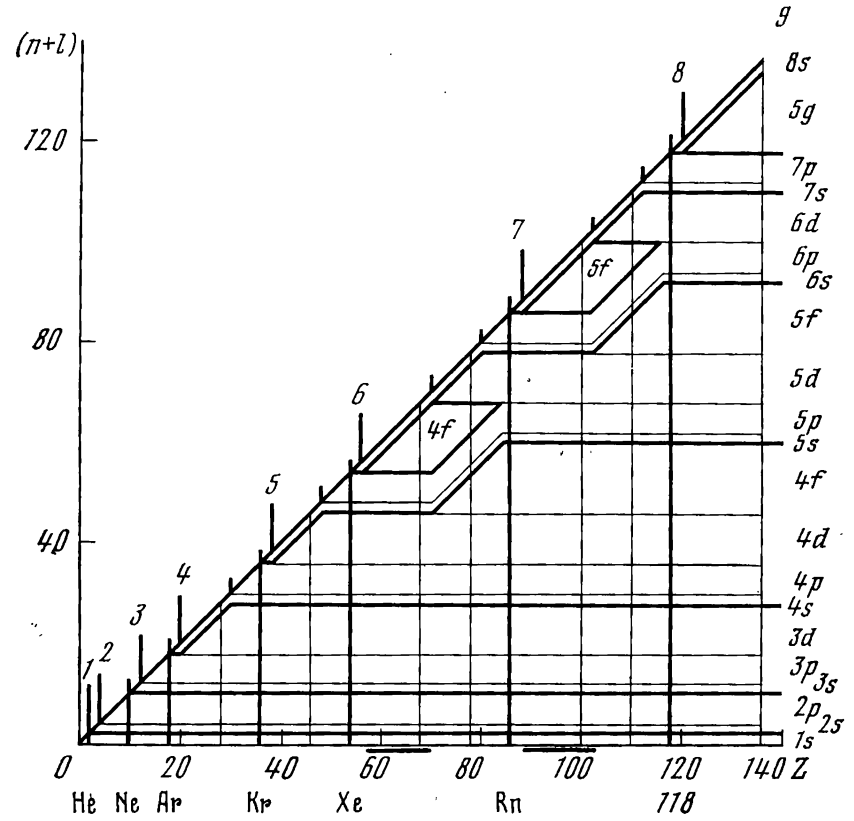
однако они несравненно меньше, чем отклонения реального порядка от водородоподобной схемы (см. рис. 1).

Если просуммировать числа электронов на рис. 2, то можно построить диаграмму (рис. 3), аналогичную нашей (см. рис. 1) [2, 3]. Расчетные данные В. М. Клечковского изображены на ней сплошными линиями, а опытные показаны точками и только там, где они не совпадают с расчетами. Схема В. М. Клечковского гораздо лучше отражает реальное распределение электронов по оболочкам, чем водородоподобная схема. Она только сдвинута на 2 электрона относительно периодической таблицы Менделеева. Мелкие отклонения в схеме В. М. Клечковского все же остаются, но они не так уж велики.

В литературе можно встретить высказывания, согласно которым периодическая таблица Менделеева считается «искаженной» водородоподобной схемой.

В некоторых трудах, в частности в работах А. Ф. Капустинского [7], указывается, что при высоких давлениях внешние электроны вдавливаются во внутренние оболочки, ранее остававшиеся незавершенными. В результате менделеевская периодичность исчезает — вырождается и восстанавливается идеальная водородоподобная схема. Критика подобных мнений имеется в работах В. М. Клечковского [5], в книге Д. Н. Трифонова [6] и в наших работах [2, 3].

Таким образом, получается, что одновременно существуют две основные схемы для порядка заполнения электронных оболочек: водородоподобная



и схема $(n + l)$-групп В. М. Клечковского. Они резко отличаются одна от другой.

Возникает вопрос о том, можно ли согласовать их между собой и с реальным строением электронных оболочек? Здесь мы покажем, что это возможно.

Общая схема заполнения электронных оболочек атомов. Мы считаем, что противопоставлять водородоподобную схему строения электронных оболочек атомов схеме $(n + l)$-групп В. М. Клечковского не следует. Нельзя ставить вопрос о том, какая из них верна. Верны обе.

Водородоподобная схема характерна для строения внутренних частей электронных оболочек, ближайших к атомному ядру. Ее правильность подтверждается структурой рентгеновских спектров атомов. Эта схема практически не влияет на строение внешних частей электронных оболочек, а следовательно, и на химические свойства атомов.

Схема же $(n + l)$-групп, полученная путем анализа оптических спектральных данных, характерна только для строения наружных частей электронных оболочек, которое определяет химические свойства атомов.

На рис. 4 справа изображен порядок чередования электронных оболочек и подоболочек по водородоподобной схеме, при котором орбитальные квантовые числа l возрастают снизу вверх. Слева — приведен порядок заполнения $(n + l)$-групп, согласно которому орбитальные квантовые числа внутри группы возрастают сверху вниз. Расстояния по вертикали пропорциональны числу электронов в каждой оболочке и подоболочке. Вследствие прямо

противоположного чередования оболочек справа (внутри атомов вблизи от ядра) и слева (на поверхности атомов) в средней части рисунка неизбежно возникает пересечение одноименных электронных оболочек.

Это — очень важный факт. Из него следует, что в электронных оболочках атомов существуют не две, а три зоны: внутренняя, водородоподобная, средняя — зона пересечения электронных оболочек и наружная — $(n + l)$-групп.

На рис. 4 наглядно иллюстрируется сам факт неизбежности пересечений электронных оболочек в средней зоне атомов. Однако сложность картины пересечения затрудняет ее расшифровку. Поэтому приведем построение зоны пересечения оболочек иным образом (рис. 5).

На оси абсцисс отложим атомные номера элементов таблицы Менделеева Z. Справа укажем порядок чередования электронных оболочек по водородоподобной схеме (n-группы) в том же масштабе, что и по оси абсцисс. Слева разместим порядок заполнения $(n + l)$-групп. Вертикальными сплошными линиями отметим границы периодов, а пунктирными — границы рядов таблицы Менделеева. Горизонтальными сплошными линиями выделим границы электронных оболочек, а пунктирными — границы подоболочек. Кроме того, из начала координат проведем прямую под углом 45°. Ординаты этой линии будут равны Z и потому должны соответствовать суммарному числу электронов в каждом атоме. Следовательно, при любом распределении электронов по оболочкам все они должны располагаться только ниже наклонной линии.

Если теперь взять схему распределения электронов по оболочкам и подоболочкам, изображенную на рис. 3, и все части электронных оболочек, выступающие выше наклонной прямой, выходящей из начала координат, сместить книзу, то они могут быть размещены там на местах пропусков во внутренних электронных оболочках. В результате мы получим общую картину чередования электронных оболочек в атомах таблицы Менделеева (см. рис. 5).

В нижней и правой частях рисунка чередование электронных оболочек останется водородоподобным (оно соответствует внутренней зоне оболочек, ближайших к ядру атомов). Строение внешней части электронных оболочек будет соответствовать чередованию $(n + l)$-групп по В. М. Клечковскому, показанному на рис. 5 слева и спроектированному по горизонтали на диагональ. Эта схема изображается на рис. 5 узкой полосой из двух электронов, идущей вдоль диагонали чертежа. Между осью абсцисс и диагональю будет размещаться средняя зона пересечения электронных оболочек. Основная ее часть находится в верхнем правом углу рисунка.

Анализируя рис. 5, необходимо заметить следующее.

Все $(n + l)$-группы заканчиваются s^2-электронами ($l = 0$). Начиная с $(n + l)$-2 верхняя граница $(n + l)$-групп получается сдвинутой на 2 электрона выше границ периодов таблицы Менделеева.

Верхние границы водородоподобных групп (n-групп) на рис. 5 имеют вид горизонтальных прямых линий.

До $Z = 18$ заполнение электронных оболочек по $(n + l)$-группам и по водородоподобной схеме не отличается одно от другого. Начиная с $Z = 19$ электроны последующих электронных оболочек появляются на поверхности атомов раньше, чем по водородоподобной схеме. На рис. 5 это соответствует появлению двухэлектронных полос вдоль диагонали диаграммы.

В средней (по радиусу) зоне электронных оболочек атомов возникает их

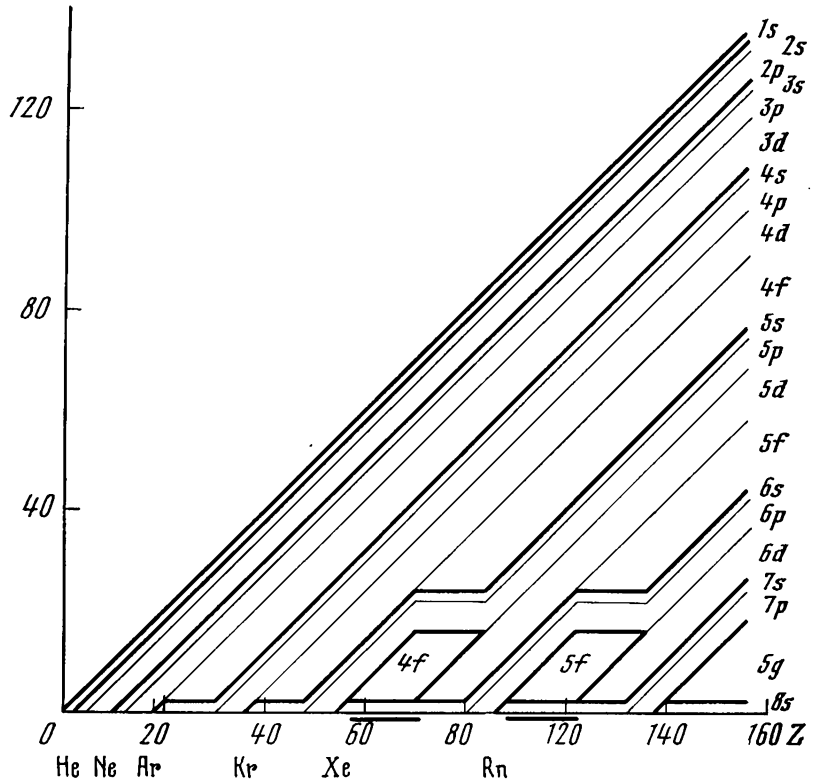


Рис. 6. Преобразованная схема заполнения электронных оболочек атомов

пересечение: $4f^{14}$- и $5f^{14}$-оболочки претерпевают разрыв, в который вклиниваются $5s^2p^6$- и $6s^2p^6$-электронные оболочки. Зоны заполнения $4f^{14}$- и $5f^{14}$-оболочек электронами являются зонами лантанидов и актинидов в таблице Менделеева, что отмечено внизу чертежа отрезками горизонтальных прямых линий. После пересечения электронных оболочек внутри атомов возникает водородоподобный порядок чередования оболочек.

После $Z = 120$ во внешних электронных оболочках атомов под слоем из $8s^2$-электронов должен появиться слой из $5g^{18}$-электронов.

6. Мелкие отклонения в порядке заполнения электронных оболочек (неполное число $4s$-, $5s$-электронов на границе с $3d$- и $4d$-электронами и появление отдельных $5d$-, $6d$-электронов между s- и f-оболочками, а также $7d$- и $8d$-электронов между s- и g-оболочками) правилами $(n + l)$-групп В. М. Клечковского не регламентируются.

Чтобы качественно связать схему чередования электронных оболочек с энергией их электронов, целесообразно несколько изменить расположение рис. 5. Следует опустить его диагональ в горизонтальное положение, сместив все точки чертежа по вертикали книзу, а затем построить его зеркальное отражение относительно оси абсцисс. Тогда получится картина, изображенная на рис. 6. Бывшая диагональ займет горизонтальное положение, что будет соответствовать постоянству энергии связи электронов. Фактически

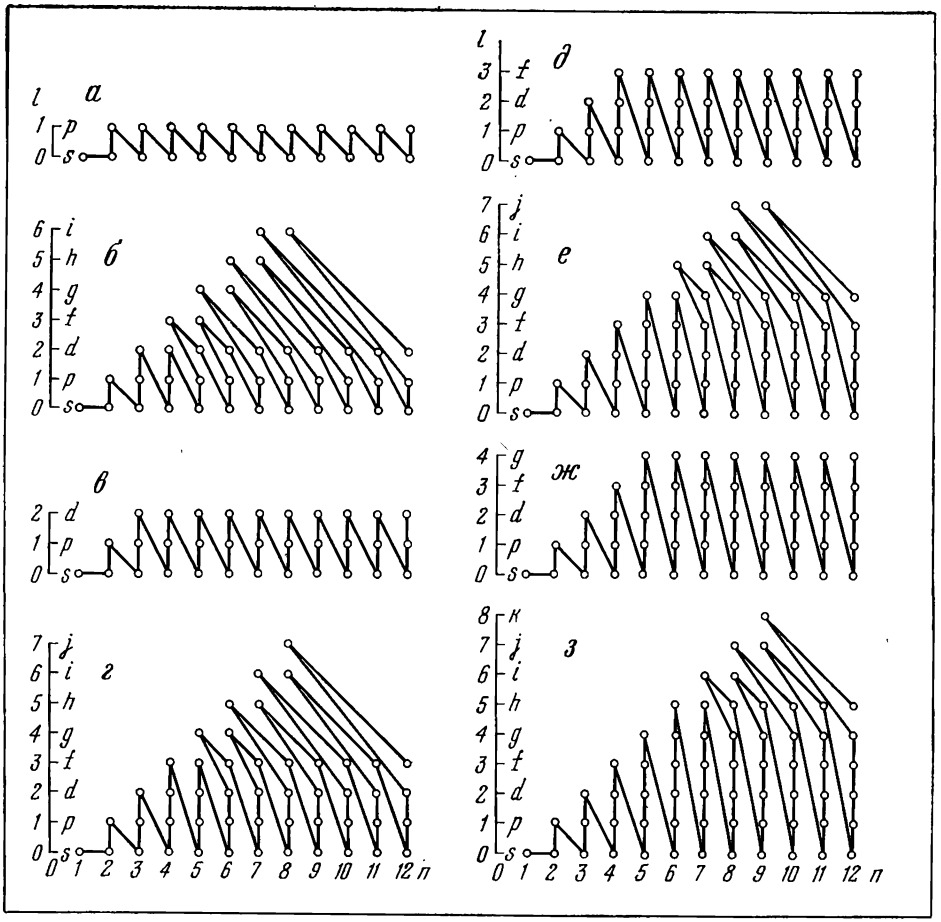


Рис. 7. Чередование электронных оболочек при различных степенях ионизации

энергии электронов на поверхности атомов изменяются в относительно узких пределах двух десятков электронвольт.

Электроны, находящиеся на новой диагонали (см. рис. 6), будут символизировать, что вместе с ростом заряда ядра Z ближайшие к ядрам электроны будут очень прочно связаны с ядром. Энергии их связи измерятся тысячами электронвольт.

Анализируя рис. 6, заметим, что порядок чередования электронных оболочек по мере роста атомных номеров элементов Z на разных уровнях будет различным. Это показано на рис. 7, где по горизонтальной оси отложены значения главных квантовых чисел n, а по вертикальной — величины орбитальных квантовых чисел l и наименование соответствующих электронных состояний: s, p, d, f, g и т. д. Последовательные сочетания квантовых чисел соединены между собой ломаными линиями.

Первый, ближайший к поверхности атомов двухэлектронный слой будет характерен чередованием только двух значений орбитальных квантовых чисел $l = 0$ и $l = 1$ для s- и p-электронных состояний.

Второй слой из 14 электронов вначале даст чередование s-, p- и d-электронных состояний. Затем после перехода в зону пересечения электронных оболочек значения орбитальных l и главных квантовых чисел n будут то увеличиваться, то уменьшаться.

Третий слой из восьми электронов снова даст более простое чередование орбитальных квантовых чисел: l, равное 0, 1 и 2 для s-, p- и d-электронных состояний.

Четвертый слой электронов по чередованию оболочек будет напоминать второй.

Дальнейшая картина чередования электронных оболочек во все более глубоких электронных слоях ясна из рис. 7. Она экстраполирована нами за существующие границы таблицы элементов Менделеева.

Возвращаясь к рис. 6, заметим, что по вертикали вверх откладываются числа электронов, отсчитываемые от периферии атомов к центру. Все линии, параллельные диагонали чертежа, будут соответствовать изоэлектронным рядам, т. е. рядам ионов с одинаковыми числами электронов в каждом из них, но с разными зарядами ядер Z.

Шкала энергий на рис. 6 не приводится, так как энергетическая картина по оболочкам дается не количественная, а только качественная.

Чтобы получить количественное представление, следует вместо числа электронов по оси ординат откладывать значения корней квадратных из потенциалов ионизации атомов и ионов. Такая картина приведена в нашей работе [3]. На ней изображены изоэлектронные ряды.

Объединяя группы таких рядов в подоболочки и оболочки с одинаковыми сочетаниями главных n и орбитальных l квантовых чисел, получим следующую, слегка идеализированную, но зато количественную картину (рис. 8).

Сравнивая рис. 6 и 8, легко заметить их явную аналогию. Разница заключается только в том, что на рис. 8 наклоны изоэлектронных рядов в разных оболочках получаются при разных n разными. Это хорошо выявляет неизбежность пересечения изоэлектронных рядов (и электронных оболочек) в средней (по радиусу) зоне атомов. Крутые ряды, расположенные правее пологих, обязательно пересекут их. (Например, крутые ряды $4f^{14}$-электронов, расположенные правее более пологих рядов для $5s^2p^6$-электронов, действительно пересекут их в глубинах атомов.)

Подтверждение того, что электронные оболочки в атомах пересекаются, можно заметить при анализе давних диаграмм Мозели для краев поглощения рентгеновских спектров. Одну диаграмму, взятую нами из книги М. А. Ельяшевича [8], приводим для сравнения на рис. 9. По оси абсцисс отложены атомные номера элементов Z, а по оси ординат — значения корней квадратных из отношений частот к постоянной Ридберга, т. е. величин, пропорциональных энергиям соответствующих термов.

На рис. 9 ясно видно пересечение кривых для $4s$- и $3d$-, а также $5s$- и $4d$-электронов в наружной части оболочек атомов. В средней части оболочек наблюдается пересечение кривых для $4f$- и $5spd$-электронов. Можно также заметить перегиб кривых для $4spd$-электронов при $Z = 53$, т. е. для начала группы лантанидов. Перегиб кривых для $4f$-электронов начинается при $Z = 68$ — при пересечении кривой для $5d$-электронов. (В работе [8] на рис. 13.5 они ошибочно помечены как $4d$-электроны.)

Рис. 8 и 9 аналогичны. Для двух изоэлектронных рядов в s^2-состоянии наблюдается только одна кривая термов для краев поглощения. Для прочих

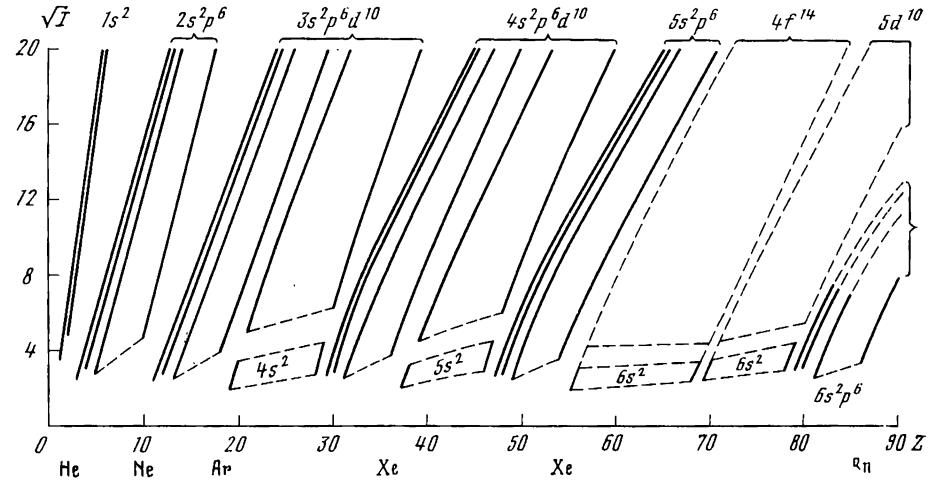


Рис. 8. Зависимость потенциалов ионизации от атомных номеров элементов по изоэлектронным рядам

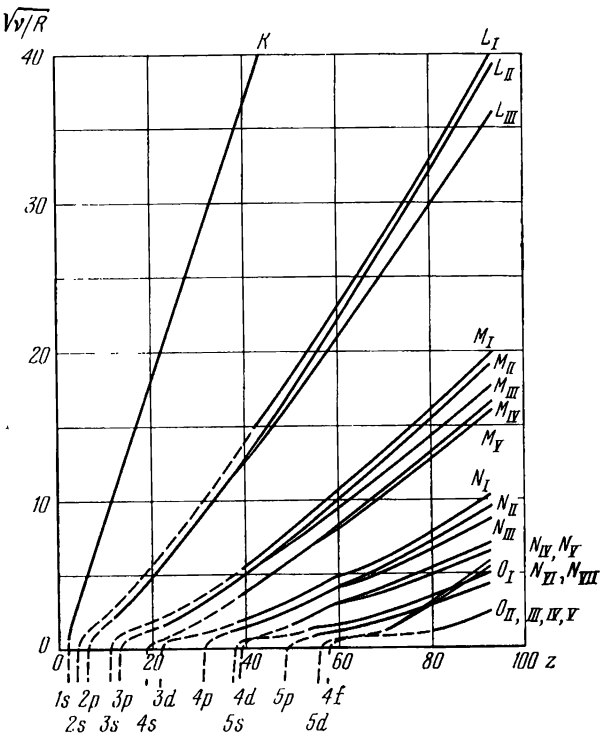


Рис. 9. Диаграмма Мозели для краев поглощения рентгеновских спектров

p^6-, d^{10}-, f^{14}-электронных оболочек наблюдается по два терма для краев поглощения.

Если диаграммы рис. 8 и 9 привести к одному масштабу, т. е. выразить энергии термов и потенциалов ионизации в одинаковых единицах, например в электронвольтах, то можно будет заметить, что энергии термов для краев поглощения получаются меньше, чем энергии потенциалов ионизации ионов. Энергии термов определяются в условиях, когда вся электронная оболочка атома заполнена, а энергия потенциалов ионизации — тогда, когда внешние электроны этой оболочки, кроме данного, уже удалены ионизацией. Отсюда следует важный вывод. Энергия электронов внутренних оболочек атомов зависит не только от их собственных квантовых состояний, но и от наличия других электронов во внешних оболочках. Это значит, что экранировать ядро могут и внутренние, и внешние электронные оболочки.

В литературе распространено утверждение, что если электрон находится снаружи электронной оболочки, то он испытывает ее экранирующее действие, а если внутри нее, то экранировки не должно быть. Это справедливо только для сферически-симметричного расположения электронных оболочек. Если же экранировка имеет место и со стороны внешних электронных оболочек на внутренние, как следует из сопоставления рис. 8 и 9, то это свидетельствует о несферичности электронных оболочек.

Поэтому при приближенных расчетах оболочек по методу Хартри — Фока необходимо учитывать также экранирующее действие внешних электронных оболочек на внутренние, что, к сожалению, часто не делается.

Резюмируя изложенное, необходимо заметить следующее.

1. Водородоподобная схема строения многоэлектронных атомов характерна для устройства внутренних частей электронных оболочек, ближайших к атомному ядру. Она соответствует рентгеновским спектрам атомов и не влияет на их химические свойства.

2. Схема $(n + l)$-групп В. М. Клечковского характерна только для строения наружных частей электронных оболочек атомов. Она отвечает оптическим спектрам атомов и определяет их химические свойства.

3. В средней (по радиусу) части электронных оболочек существует зона их пересечения.

4. Не только внутренние электроны могут экранировать внешние электроны от ядра, но и внешние влияют на связь ядра с внутренними электронами.

Литература

1. *Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц.* Курс теоретической физики, т. III, ч. 1. М., «Наука», 1972.
2. *М. М. Протодьяконов.* Свойства минералов и их электронное строение. М., «Наука», 1965.
3. *М. М. Протодьяконов.* Свойства и электронное строение породообразующих минералов. М., «Наука», 1969.
4. Справочник химика, т. I. Л.— М., Гос. научн.-техн. изд-во хим. лит., 1963.
5. *В. М. Клечковский.* Распределение атомных электронов и правило последовательного заполнения $(n + l)$-групп. М., Атомиздат, 1968.
6. *Д. Н. Трифонов.* Структура и границы периодической системы. М., Атомиздат, 1969.
7. *А. Ф. Капустинский.* К теории Земли.— В сб. «Вопросы геохимии и минералогии». М., Изд-во АН СССР, 1956.
8. *М. А. Ельяшевич.* Атомная и молекулярная спектроскопия. М., Физматгиз, 1962.

Глава 4

ПОТЕНЦИАЛЫ ИОНИЗАЦИИ АТОМОВ

Обобщение экспериментальных данных

Чтобы лучше представить себе строение электронных оболочек многоэлектронных атомов, проанализируем данные о потенциалах ионизации различных элементов. Потенциалы ионизации, как известно, представляют собой энергию в электронвольтах, необходимую для отрыва одного внешнего электрона от атома или иона. Различают нейтральные атомы, у которых суммарное число электронов равно заряду ядра Z, положительные ионы — с одним или несколькими удаленными электронами — и отрицательные ионы — с дополнительно захваченными электронами.

Потенциалы ионизации наиболее точно определяются по данным спектрального анализа как границы спектральных серий. Точный квантовомеханический расчет спектральных серий имеется только для атома водорода или одноэлектронных водородоподобных ионов, для которых волновые числа k, т. е. числа волн, укладывающихся на длине 1 *см*, подчиняются обобщенной формуле Бальмера для спектральных серий

$$k = RZ^2\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right),$$

где R — постоянная Ридберга, $см^{-1}$; n и m — целые квантовые числа ($m \geqslant (n + 1)$).

Всю совокупность волновых чисел, охватываемых этой формулой, можно наглядно изобразить графически, откладывая по оси абсцисс величины обратных квадратов от квантовых чисел $1/n^2$ и $1/m^2$, а по оси ординат — соответствующие им волновые числа k, пропорциональные им частоты колебаний или же энергии в электронвольтах. Для этого необходимо умножить значения k на переводной множитель $1{,}243954 \cdot 10^{-4}$ *эв·см*. Тогда точки каждой спектральной серии лягут на одну прямую, тангенс угла наклона которой будет соответствовать постоянной Ридберга для данного элемента.

Рассмотрим простейшую схему спектральных серий для атома водорода (рис. 1, *а*). Обычная схема получающихся при этом спектральных термов, между которыми происходят переходы электронов, показана слева, а соответствующие спектральные серии — справа. Ближе к оси ординат точки для каждой спектральной серии сгущаются, поэтому во избежание их слияния показаны только наиболее разреженные участки спектральных серий. Экстраполируя полученные прямые до пересечения с осью ординат, можно вычислить границы спектральных серий или термы по формуле

$$k = \frac{RZ^2}{n^2}, \qquad (1)$$

которая получается из предыдущей формулы, когда квантовое число m стремится к бесконечности.

На том же графике (рис. 1, *б*) справа показано по одной спектральной серии для одноэлектронных ионов, а слева изображены частоты, пропорциональные потенциалам ионизации первого изоэлектронного ряда.

Сложнее обстоит дело с определением границ спектральных серий или термов для всех остальных атомов и ионов элементов таблицы Менделеева.

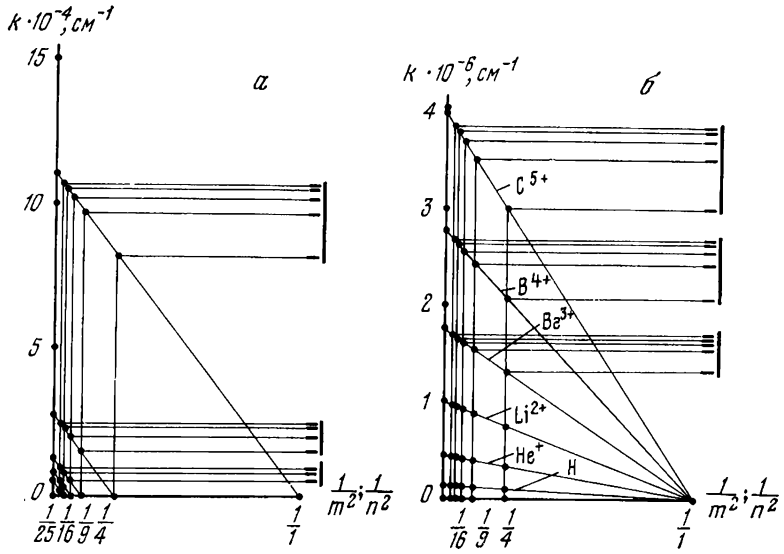


Рис. 1. Схема спектральных серий

а — для атома водорода; *б* — для водородоподобных атомов

В спектроскопии для этого обычно пользуются той же обобщенной формулой Бальмера, что и для одноэлектронных ионов. Однако решение с целыми значениями квантовых чисел n и m получить не удается. Поэтому исследователи вынуждены были перейти от действительных квантовых чисел n и m к уменьшенным их значениям или к эффективным квантовым **числам** n^* **и** m^*, как это сделали Паулинг [1], Слетер [2] и др.

$$n^* = n - d_n, \quad m^* = m - d_m,$$

где d_n и d_m — квантовые дефекты.

Такой прием является эмпирическим. По существу, при этом квантовые числа теряют свой основной смысл, так как резонансные эффекты, характерные для квантовых явлений, могут иметь место только при целочисленных их значениях. Однако этим приемом удалось вычислить весьма большое число термов, и в спектроскопии он применяется широко.

Когда значения n^* и m^* известны, вычисление волновых чисел k производится быстро и просто. Однако из опыта получаются именно волновые числа k или обратно пропорциональные им длины волн λ, по которым нужно затем найти неизвестные заранее дробные значения n^* и m^*. Обратная задача более сложна.

В самом деле, пусть из спектроскопических экспериментов известны волновые числа двух последовательных спектральных линий k' и k'' одной и той же серии. Значение постоянной Ридберга считаем известным. Тогда можно написать следующие формулы:

$$k' = T_0 - T_1 = RZ^2\left[\frac{1}{(n^*)^2} - \frac{1}{(m^*)^2}\right],$$

$$k'' = T_0 - T_2 = RZ^2\left[\frac{1}{(n^*)^2} - \frac{1}{(m^*+1)^2}\right].$$

Соответствующие значения термов

$$T_0 = \frac{RZ^2}{(n^*)^2}; \qquad T_1 = \frac{RZ^2}{(m^*)^2}; \qquad T_2 = \frac{RZ^2}{(m^*+1)^2}.$$

Переходя от волновых чисел k к длинам волн в ангстремах λ, получим

$$\lambda' = \frac{2\pi (n^*)^2 (m^*)^2 \cdot 10^8}{R|(m^*)^2 - (n^*)^2|Z^2} \text{ и } \lambda'' = \frac{2\pi (n^*)^2 (m^*+1)^2 \cdot 10^8}{R|(m^*+1)^2 - (n^*)^2|Z^2}.$$

Исключая из этих двух уравнений величину $(n^*)^2$, получим после ряда преобразований

$$(m^*)^4 + 2(m^*)^3 + (m^*)^2 - 2K(m^*) - K = 0,$$

где

$$K = \frac{RZ^2\lambda'\lambda''}{2\pi(\lambda' - \lambda'')\cdot 10^8} = \frac{(m^*)^4 + 2(m^*)^3 + (m^*)^2}{2m^* + 1}.$$

Задаваясь различными целыми значениями m^*, вычислим величину K, построим график зависимости между m^* и K. По графику можно затем, зная из опыта величину K, определить искомое значение m^*. Подставляя последнее в одно из исходных уравнений, можно вычислить значение n^*. В качестве n и m выбирают ближайшие к n^* и m^* бóльшие целые числа, после чего удается определить величины квантовых дефектов d_n и d_m.

Как видим, метод вычисления термов довольно кропотлив. Поэтому найденные значения термов, как оптических, так и рентгеновских, обычно сводят в таблицы, публикуемые в справочниках. Там же приводятся и данные о границах спектральных серий, т. е. о потенциалах ионизации атомов.

Перейдем теперь к анализу зависимостей, которым подчиняется вся совокупность данных о потенциалах ионизации разных атомов и ионов.

Обычно большинство исследователей в своих работах приводят диаграмму первых потенциалов ионизации элементов в зависимости от их атомных по-

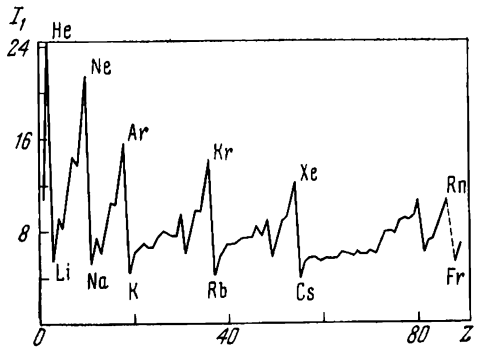


Рис. 2. Первые потенциалы ионизации элементов

мером Z (рис. 2). На такой диаграмме можно ясно проследить границы периодов таблицы Менделеева, так как инертные газы выделяются пиковыми значениями потенциалов ионизации, а следующие за ними щелочные металлы, наоборот, характеризуются низкими их значениями. Однако уловить из такой диаграммы другие закономерности довольно трудно.

Значительно больше информации можно получить, группируя величины потенциалов ионизации по изоэлектронным рядам. Как известно, изоэлектронным называется ряд ионов, соответствующий одному и тому же числу электронов N в оболочке при различных зарядах ядер Z.

Изучением закономерностей изменения потенциалов ионизации по изоэлектронным рядам занимались многие исследователи, краткий обзор работ которых имеется в [3]. Большинство из них, в том числе и мы, пользовались методом последовательных разностей.

В первом приближении вторые разности оказались приблизительно постоянными. Отсюда следует, что первые разности представляют собой арифметическую прогрессию, а потенциалы ионизации — сумму членов этой прогрессии. Выражение для потенциала ионизации при этом может быть записано в виде

$$I_N = I_1 + \Delta_1 (Z - N) + \frac{\Delta_2}{2} (Z - N)(Z - N - 1). \quad (2)$$

Обозначая

$$a = \frac{\Delta_2}{2}, \qquad b = 2N + 1 - \frac{2\Delta_1}{\Delta_2},$$

$$c = \frac{2}{\Delta_2} (I_1 - \Delta_1 N) + N\ (N + 1),$$

получим уравнение полинома второй степени

$$I_N = a\,(Z^2 - bZ + c)$$

или

$$I_N = a\left[\left(Z - \frac{b}{2}\right)^2 - \left(\frac{b^2}{4} - c\right)\right]. \quad (3)$$

Очевидно, величина a имеет размерность энергии, а остальные величины — безразмерные.

Формулы других исследователей, пользовавшихся тем же методом последовательных разностей, отличаются от этих формул только иными буквенными обозначениями или алгебраическими преобразованиями.

По-видимому, первыми исследователями, получившими такую зависимость, были Крюгер и Шупп [4], которые изучали последовательность потенциалов ионизации для 28- и 46-го изоэлектронных рядов.

Е. Лисицын [5] по аналогии с теоретическим уравнением Хиллерааса для второго изоэлектронного ряда и с уравнением Слетера принял

$$a = \frac{Rh}{(n - d)^2},$$

где d — квантовый дефект.

Пользуясь составленной им сводкой известных до 1935 г. опытных данных, Е. Лисицын произвел вычисление коэффициентов уравнений для двенадцати изоэлектронных рядов, в которых имелось по шесть вторых разностей. Для остальных 49 изоэлектронных рядов он не имел достаточного количества точных экспериментальных данных и поэтому широко использовал интерполяцию, экстраполяцию и ряд косвенных соображений. В результате он получил таблицы коэффициентов уравнений для 62 изоэлектронных рядов и затем вычислил экстраполированные значения потенциалов ионизации для всех этих рядов вплоть до урана. Вычисленные Е. Лисицыным значения потенциалов ионизации приведены в известном справочнике Ландольдта — Бернштейна [6] и во многих других справочниках.

К сожалению, Е. Лисицын почему-то не воспользовался приемом графического изображения изоэлектронных рядов в координатах Z и I или $\sqrt{I}$, а ограничился менее наглядным графиком в координатах N и $\sqrt{I}$ (рис. 3),

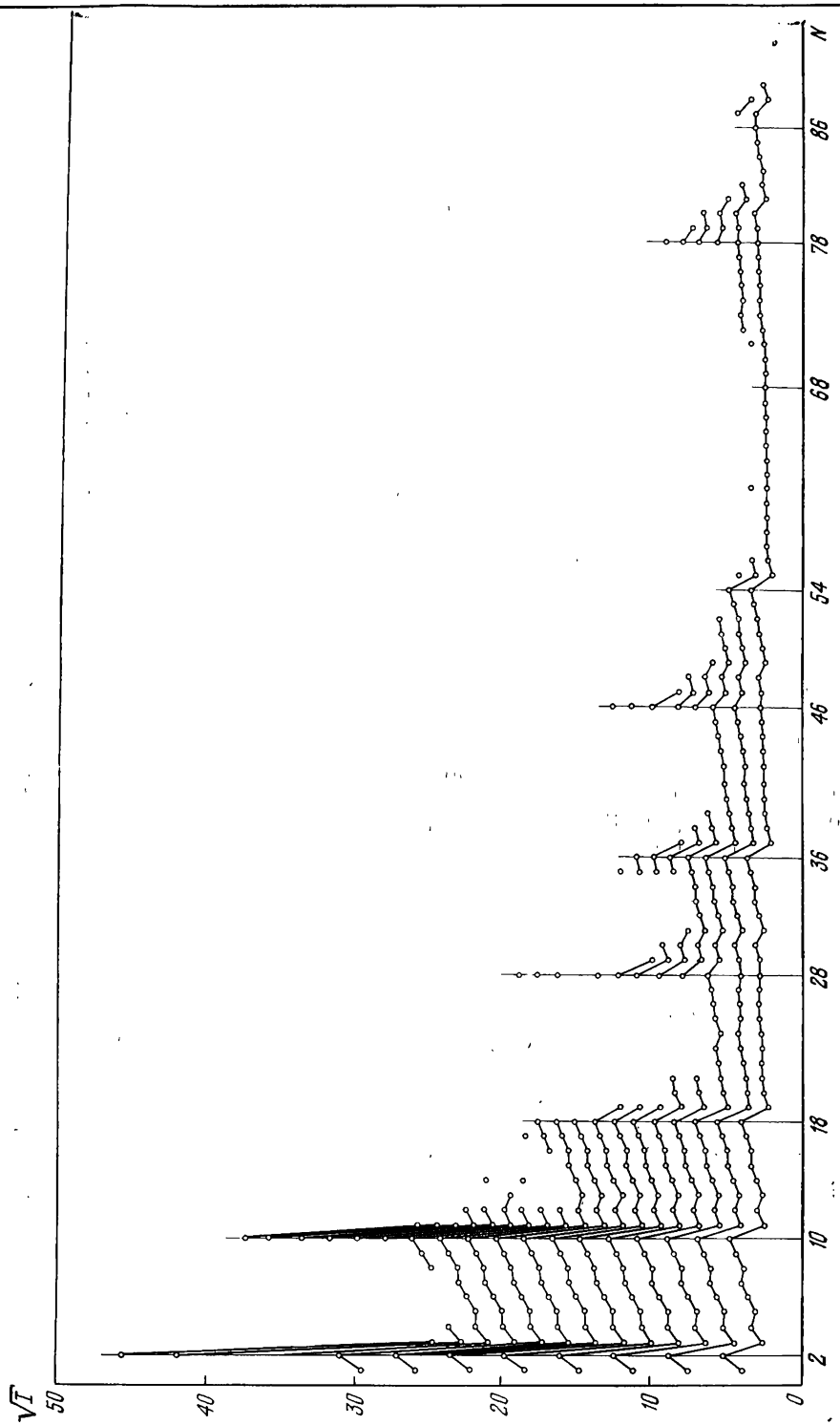


Рис. 3. Зависимость квадратных корней из потенциалов ионизации от номеров изоэлектронных рядов (по Е. Лисицыну)

на котором были проведены ломаные линии, соединяющие точки с одинаковыми степенями ионизации. Это не позволило ему заметить, что многие изоэлектронные ряды в координатах Z и $\sqrt{I}$ в пределах одной и той же электронной оболочки пересекаются одни с другими. У него получалось, что некоторые электроны, прочнее связанные с ядром, ионизировались раньше, чем связанные более слабо. Это заставило нас усомниться в корректности полученных им значений коэффициентов уравнений изоэлектронных рядов. Несмотря на это, работа Е. Лисицына явилась основополагающей в области исследования потенциалов ионизации.

Некоторые более поздние исследователи, по-видимому, не знали оригинальной работы Е. Лисицына, опубликованной в Финляндии на немецком языке, но анализируя численные данные по потенциалам ионизации, известные из справочников, самостоятельно пришли к тем же значениям коэффициентов, которые он принял при своих экстраполяциях.

В работах П. В. Немцева [7, 8] численные значения коэффициентов уравнений изоэлектронных рядов определялись на основании анализа только первых трех потенциалов ионизации каждого изоэлектронного ряда, а не всех наличных членов ряда, что является менее надежным. Кроме того, он вычислял не три коэффициента для каждого ряда, а только один.

А. Г. Большаков и В. М. Червяков [9] также самостоятельно пришли к выводу о постоянстве вторых разностей и к выражению потенциалов ионизации для изоэлектронных рядов суммой членов арифметической прогрессии. Наиболее полной и обстоятельной является работа В. М. Червякова [10], в которой не только вновь выводятся значения всех трех коэффициентов для 61 изоэлектронного ряда, но и вычисляются значения эффективных зарядов, эффективных квантовых чисел, радиусов ионов и рентгеновских термов. Однако, по-видимому, В. М. Червяков использовал в основном опубликованные в справочниках, экстраполированные Е. Лисицыным величины, и потому полученные им численные значения коэффициентов нуждаются в корректировке.

Значительно большее количество опытных данных обобщено в таблицах атомных уровней, собранных Ш. Мурр [11]. Имели место попытки интерполяции и экстраполяции этих данных, выполненные В. Финкельбургом и другими исследователями [12, 13], а также В. Лотцем [14, 15]. Наиболее обстоятельный разбор этих работ выполнен А. А. Савельевым [16—18].

Сначала проанализируем данные о потенциалах ионизации атомов и ионов в первом приближении при их интерполяции в виде суммы членов арифметической прогрессии.

Приближенные уравнения изоэлектронных рядов

Исследуем формулу (3) [3]. Данное уравнение выражается параболой с вертикальной осью симметрии (рис. 4). Беря первую производную и приравнивая ее к нулю, получим точку минимума. Она соответствует

$$Z = \frac{b}{2} = N + \frac{1}{2} - \frac{\Delta_1}{\Delta_2}.$$

Следовательно, величина $b/2$ равняется такому заряду ядра Z, при котором потенциал ионизации достигает минимальной величины. Подставляя это значение Z в уравнение параболы, найдем, что точка минимума лежит

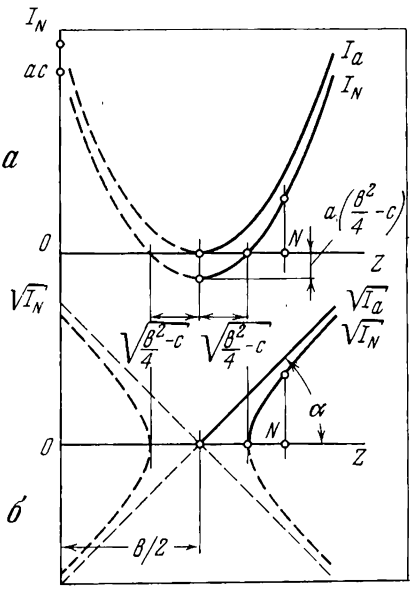


Рис. 4. Зависимость потенциалов ионизации (I_N) N-го изоэлектронного ряда от атомного номера Z

а — в координатах I_N и Z;
б — в координатах $\sqrt{I_N}$ и Z

ниже оси абсцисс и имеет ординату

$$Y_{\min} = = a\left(\frac{b^2}{4} - c\right) = \frac{\Delta_2}{2}\left(N - \frac{b}{2}\right)^2 - I_1.$$

Эта расчетная точка в натуре реализоваться не может, так как изменение знака потенциала ионизации на обратный свидетельствует об избытке энергии у электрона, который в этом случае не может удерживаться ядром.

Приравнивая потенциал ионизации нулю, найдем точки пересечения параболы с осью абсцисс; откуда

$$Z = \frac{b}{2} \pm \sqrt{\frac{b^2}{4} - c}.$$

Если поднять кривую I_N кверху на величину $a\,(b^2/4 - c)$, то точка ее минимума совпадет с осью абсцисс. Уравнение этой смещенной параболы будет следующим:

$$I_a = a\left(Z - \frac{b}{2}\right)^2. \qquad (4)$$

Сопоставляя его с уравнением потенциалов ионизации для водородоподобных одноэлектронных ионов, заметим, что они аналогичны, только вместо полного заряда Z в уравнении для кривой фигурирует меньшая величина $Z^* = Z - b/2$, которая представляет собой безразмерную величину, характеризующую эффективный заряд, действующий на удаляемый электрон. Величина $b/2$ будет определять «экранирующий заряд», обусловленный действием остающихся в ионе $N - 1$ электронов.

Обычно в литературе при расчете экранировки принимают, что заряды внутренних электронов распределены вокруг ядра сферически-симметрично [19]. При этом их действие на внешний электрон будет эквивалентно действию суммарного заряда всех экранирующих электронов, сосредоточенному в центре ядра. Таким образом, экранирующий заряд принимается равным $b/2 = N - 1$. Наоборот, действие сферически-симметричного заряда на электроны, находящиеся внутри сферы из других электронов, будет равно нулю ($b/2 = 0$).

Однако анализ эмпирических значений экранирующих зарядов $b/2$, полученных из уравнений изоэлектронных рядов, показывает, что для всех рядов фактически $N - 1 > b/2 > 0$ и только для одноэлектронного водородоподобного ряда $b/2 = 0$.

Разницу между теоретическим значением экранирующего сферически-симметричного заряда и фактическим $b/2$ обычно называют дефектом экранировки.

Ряд исследователей, например [19], качественно объясняют появление дефекта экранировки существованием проникающих орбит, когда некоторые электроны часть времени проводят внутри предыдущей сферически-симметричной электронной оболочки, не испытывая ее экранирующего действия.

Ниже будет показано, что причина различия между фактическим и теоретическим значениями экранирующего заряда заключаются в том, что гипотеза о сферически-симметричных оболочках не соответствует действительности.

Если же считать, что электроны вокруг ядра периодически располагаются в виде симметричных многоугольных, а не сферических фигур, то величина $b/2$ может быть объяснена не только качественно, но и количественно.

Так как кривые I_a и I_N (рис. 4) одинаковы, но смещены одна относительно другой по вертикали, то разность их ординат для любой точки дает одну и ту же величину, не зависящую от заряда ядра Z. Эта величина представляет собой энергию, теряемую остающимися в ионе электронами при удалении из него рассматриваемого электрона. Пока электрон находился в атоме или ионе, он отталкивал остальные электроны от себя, ослабляя их связь с ядром и увеличивая размеры электронной оболочки. При ионизации (удалении) этого электрона все остальные электроны имеют возможность перестроиться, приблизиться к ядру и прочнее связаться с ним. При этом они выделяют избыток энергии, передавая ее отрываемому электрону. Вследствие этого потенциал ионизации водородоподобного, но экранированного иона I_a уменьшается на величину:

$$a\left[\frac{b^2}{4}-c\right]=\frac{\Delta_2}{2}\left[N-\frac{b}{2}\right]^2-I_1,$$

отсюда

$$I_N=I_1+\frac{\Delta_2}{2}\left[\left(Z-\frac{b}{2}\right)^2-\left(N-\frac{b}{2}\right)^2\right]. \qquad (5)$$

Из этой, а также из предыдущих формул видно, что для каждого изоэлектронного ряда помимо известных величин Z и N нужно еще иметь численные значения трех констант: первого потенциала ионизации I_1, среднего значения второй разности $\overline{\Delta_2}$ и экранирующего заряда $b/2$.

Кривые для потенциалов ионизации одно- и двухэлектронных рядов идут очень круто вверх, а для многоэлектронных рядов они располагаются значительно положе. Это затрудняет изображение на одной и той же диаграмме всех кривых потенциалов ионизации для большого числа элементов таблицы Менделеева.

Для получения такой обозримой диаграммы необходимо уменьшить крутизну кривых и по возможности спрямить их. Простейшим способом спрямления кривых будет извлечение из уравнений квадратного корня. Но так как формулы для потенциалов ионизации (3) и (5) не представляют собой полных квадратов, то для таких атомов и ионов вместо прямой линии, как для водородоподобного иона, мы получим кривую, идущую несколько круче.

Если вместо величины I_N по оси ординат откладывать квадратный корень из нее $\sqrt{I_N}$, то уравнения параболы (3) и (5) превращаются в уравнение гиперболы, горизонтальная ось симметрии которой совпадает с осью абсцисс, а вертикальная ось пересекает ее в точке $b/2$ (рис. 4, *б*).

Гипербола имеет асимптоты, выходящие из этой точки и описываемые уравнением

$$\sqrt{I_a}=\pm\sqrt{a}\left(Z-\frac{b}{2}\right).$$

Асимптоты составляют с осью абсцисс угол α, для которого

$$\operatorname{tg}\alpha = \sqrt{a} = \sqrt{\frac{\Delta_2}{2}}. \qquad (6)$$

Гипербола пересекает ось абсцисс в точках с координатами

$$Z = \frac{b}{2} \pm \sqrt{\frac{b^2}{4} - c}.$$

На рис. 4, *а* и *б* физический смысл имеют только правые положительные ветви кривых, которые выделены жирной линией.

В нашей работе [3] были собраны наиболее полные тогда опытные данные по потенциалам ионизации и построены диаграммы их изменения по изоэлектронным рядам. Эта работа была затем продолжена А. А. Савельевым [16—18], который существенно пополнил эту таблицу путем обобщения мировой литературы, а также уточнил собранные данные, сопоставляя результаты различных исследователей, отбирая наиболее достоверные и проводя пересчеты на одни и те же значения мировых констант, которые за большой период времени несколько раз уточнялись.

Возьмем эти данные, извлечем из каждого потенциала ионизации, выраженного в электронвольтах, квадратный корень и перенесем полученные результаты на рис. 5. По оси абсцисс нанесены атомные номера элементов Z, а по оси ординат — значения $\sqrt{I_N}$. Все точки, относящиеся к одному и тому же изоэлектронному ряду, соединим плавными кривыми. Сопоставляя этот рисунок с рис. 3, построенным Е. Лисицыным, заметим, что при соединении точек каждого наклонного изоэлектронного ряда плавными кривыми картина получается значительно более ясной, чем при соединении ломаными линиями точек с равными степенями ионизации для вертикальных изоэлектронных рядов.

Насколько нам известно, способ графического изображения изоэлектронных рядов еще в 1930 г. был применен Браунбеком [20]. Однако он пытался спрямить искривленные изоэлектронные ряды вместо того, чтобы искать их асимптоты, и потому получил существенно завышенные значения для тангенсов углов их наклона. По-видимому, это обстоятельство и послужило причиной того, что Е. Лисицын не воспользовался этим весьма наглядным способом. Не использовали его и другие упомянутые исследователи, занимавшиеся изучением изоэлектронных рядов.

Анализируя рис. 5, можно сделать такие выводы.

Изоэлектронные ряды имеют вид гипербол, которые быстро приближаются к своим асимптотам и превращаются в прямые линии. Первые два ряда практически не отличаются от прямых линий.

Изоэлектронные ряды группируются в расходящиеся пучки линий. Число таких рядов в каждом пучке точно соответствует числу элементов в рядах и периодах таблицы Менделеева:

Период	Ряд	Число линий в пучке	Период	Ряд	Число линий в пучке
I	1	2	V	6	10 | 18
II	2	8		7	8 |
III	3	8	VI	8	24 | 32
IV	4	10 | 18		9	8 |
	5	8 |	VII	10	(24) * | 32
				11	(8) |

* Цифры в скобках написаны по аналогии с предыдущими периодами.

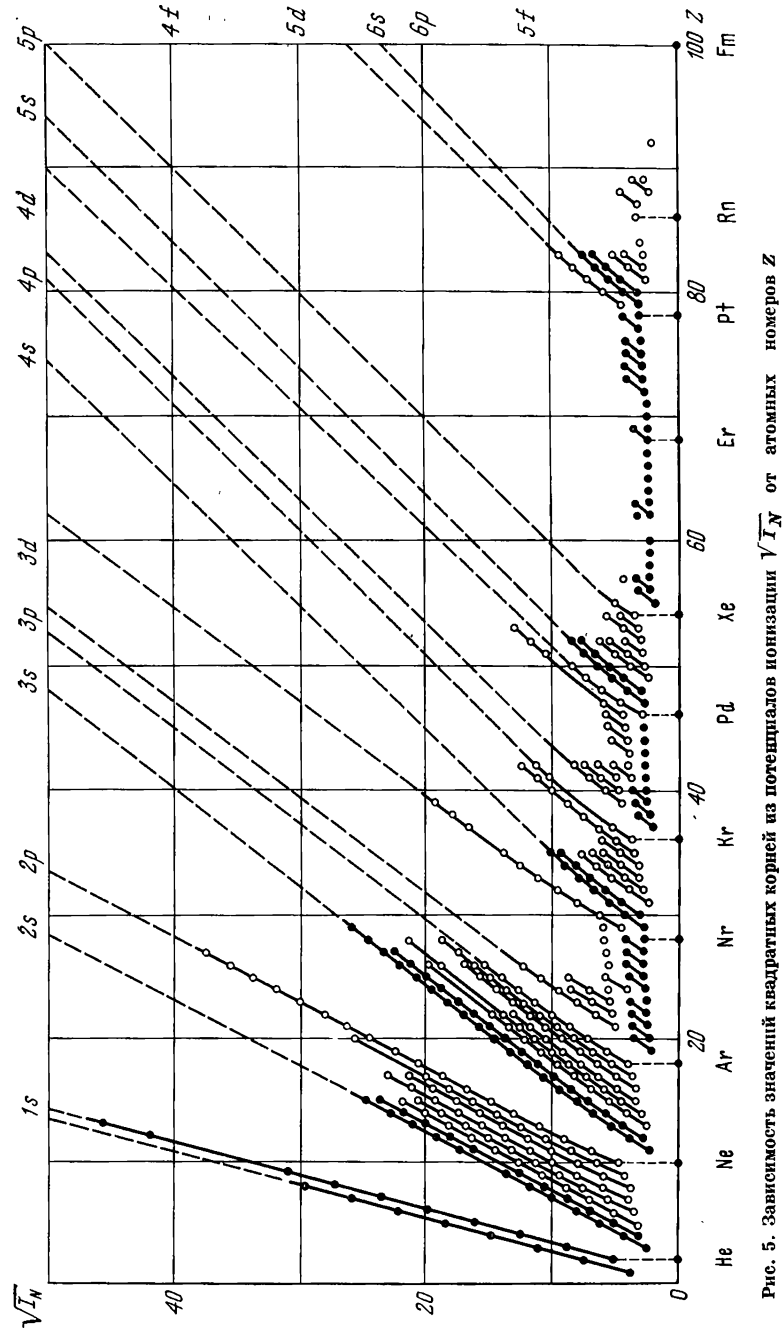


Рис. 5. Зависимость значений квадратных корней из потенциалов ионизации $\sqrt{I_N}$ от атомных номеров z

Не все пучки расходятся. Некоторые из них идут почти параллельно один другому. Эта группировка соответствует одинаковым главным квантовым числам n:

n	$2n^2$	Число линий в пучке	n	$2n^2$	Число линий в пучке
1	2	2	3	18	8+10 = 18
2	8	8	4	32	8+10+(14) = 32

Дальше из-за недостатка данных эту зависимость проследить на диаграмме не удается.

По мере роста главного квантового числа n общий наклон пучков линий в изоэлектронных рядах уменьшается сначала быстро, а затем все медленнее.

В пределах каждого пучка ряды несколько сближаются, однако их асимптоты приблизительно параллельны.

Внутри каждого пучка расстояния между смежными изоэлектронными рядами не совсем одинаковы. Заметна группировка изоэлектронных рядов в подгруппы, разделенные несколько расширенными промежутками. Эта группировка приведена в пятой графе табл. 14.

В левой части таблицы показана группировка элементов в ряды и периоды таблицы Менделеева, а в правой — группировка электронов по величинам главного n и азимутального l квантовых чисел. Из сопоставления приведен-

Таблица 14

Группировка изоэлектронных рядов по периодам и рядам таблицы Менделеева и по квантовым числам n и l

По Менделееву		Число изоэлектронных рядов			l						
период	ряд				0	1	2	3	4	5	6
I	1	2	2	2	$1s^2$	$n = 1$					
II	2	8	8	2 3+3	$2s^2$ —	— $2p^6$	$n = 2$				
III	3	8	8	2 3+3	$3s^2$ —	— $3p^6$	— —	$n = 3$			
IV	4	18	10	5+5	—	—	$3d^{10}$				
	5		8	2 3+3	$4s^2$ —	— $4p^6$	— —	— —	$n = 4$		
V	6	18	10	5+5	—	—	$4d^{10}$	—			
	7		8	2 3+3	$5s^2$ —	— $5p^6$	— —	— —	— —		
VI	8	32	24	7+7 5+5	—	—	—	$4f^{11}$	—		
	9		8	2 3+3	— $6s^2$ —	— $6p^6$	$5d^{10}$ —	— —	— —	$n = 5$	
VII	10	32	24	7+7 5+5	—	—	—	$5f^{14}$	—	—	
	11		8	2 3+3	— $(7s^2)$ —	— — $(7p^6)$	$(6d^{10})$ — —	— — —	— — —	— — —	$n = 6$ — $n = 7$

ных цифр видно, что числа изоэлектронных рядов в подгруппах точно соответствуют числам электронов для соответствующих значений азимутального квантового числа l, т. е. s-электронам соответствуют 2 изоэлектронных ряда, p-электронам — 6 рядов, d-электронам — 10 рядов и f-электронам — 14 рядов.

В этой таблице электронные оболочки, относящиеся к одинаковым главным квантовым числам n, обведены двойной чертой. Нетрудно заметить, что начиная с $n = 4$ электронные оболочки перекрывают одна другую. В порядке заполнения квантовых уровней, характеризуемых главным квантовым числом n, наблюдается сдвиг относительно рядов и периодов таблицы Менделеева. Для химической периодизации бо́льшую роль начинает играть азимутальное квантовое число l, а роль главного квантового числа n отходит на второй план.

На диаграмме рис. 5 видно, что в начальной части изоэлектронных рядов, находящихся в $3d$-, $4d$- и $4f$-состояниях, появляются s-электроны более далеких оболочек.

Судя по наклонам пучков линий, изоэлектронные ряды для $4f^{14}$-электронов должны пересечься в глубине атомов с изоэлектронными рядами для $5s^2p^6$-электронов. По аналогии следует ожидать и пересечения изоэлектронных рядов для $5f^{14}$- и $6s^2p^6$-электронов.

Существенное влияние азимутального квантового числа l на порядок заполнения электронных оболочек уже давно было замечено учеными. Наиболее четко оно было сформулировано В. М. Клечковским [21], который предложил определять порядок заполнения электронных оболочек по сумме главного и азимутального квантовых чисел $(n + l)$.

На рис. 5 точки для s-электронов обозначены черными кружками, а для остальных электронов — светлыми. Кроме того, в нижней части изоэлектронных рядов отмечены точки для отрицательных ионов (они соответствуют значениям электронного сродства атомов) (см. рис. 14 на стр. 193).

Построим диаграмму (рис. 6). По оси абсцисс отложим номера изоэлектронных рядов от начала каждого пучка, а по оси ординат величины $\sqrt{I_\text{H} - I_1}$, где I_1 — первый потенциал ионизации каждого атома, а I_H — последний потенциал того же атома, соответствующий одноэлектронному водородоподобному изоэлектронному ряду. Полученные линии для каждого главного квантового числа оказываются практически прямолинейными и параллельными.

Чтобы наглядно судить о взаимном положении энергетических уровней электронов, несколько идеализируем диаграмму рис. 6. Пренебрежем отклонениями реальных линий от прямых и от параллельности между ними, а также разделим их на величину квадратного корня из первого потенциала ионизации для водорода. Тогда полученные цифры станут безразмерными. Затем поднимем полученные линии таким образом, чтобы точка для первого потенциала ионизации водорода была равна не нулю, а единице.

Для построения такой идеализированной диаграммы (рис. 7) будем откладывать по оси абсцисс номера изоэлектронных рядов от начала каждого из пучков (см. рис. 5). На этой же оси отметим удвоенные квадраты натуральных чисел $2n^2$ и проведем через эти точки вертикальные линии. Тогда каждый промежуток между ними будет соответствовать одному из значений азимутального квантового числа l: 0—1—2—3—4...

По оси ординат будем откладывать безразмерную функцию энергии, т. е. значения $\dfrac{\sqrt{I_\text{H} - I_1}}{\sqrt{R}} + 1$. Кроме того, по ней же проставим атомные номера

элементов Z для концов периодов и рядов таблицы Менделеева и проведем через эти точки систему горизонтальных линий. В результате получится прямоугольная сетка.

Для каждого значения главного n и азимутального l квантовых чисел будем, как и на рис. 6, проводить через узлы этой сетки диагональные параллельные прямые и на них точками с атомными номерами Z отмечать последовательное заполнение энергетических уровней электронами.

Заполнение оболочек начинается с самого глубокого, на чертеже нижнего уровня $1s^2$ и в пределах каждого главного квантового числа n идет по диагонали снизу вверх и слева направо, а при переходе к другому квантовому числу n происходит смещение линии влево по горизонтали, т. е. на одном и том же энергетическом уровне.

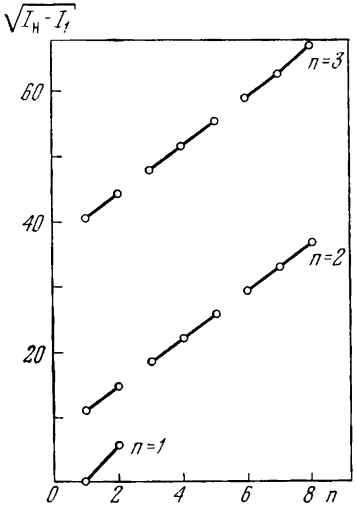


Рис. 6. Зависимость $\sqrt{I_н - I_1}$ от номеров изоэлектронных рядов в пучках

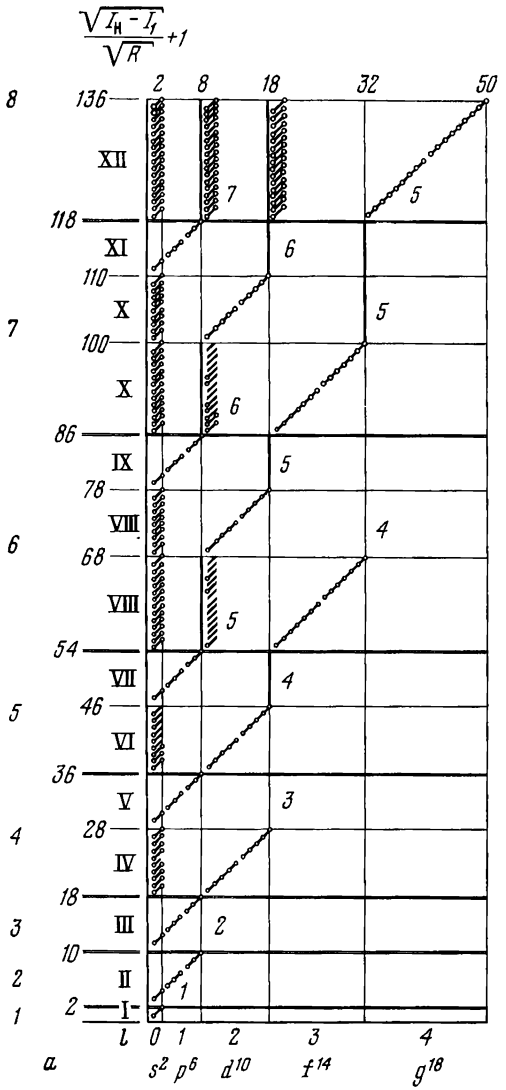
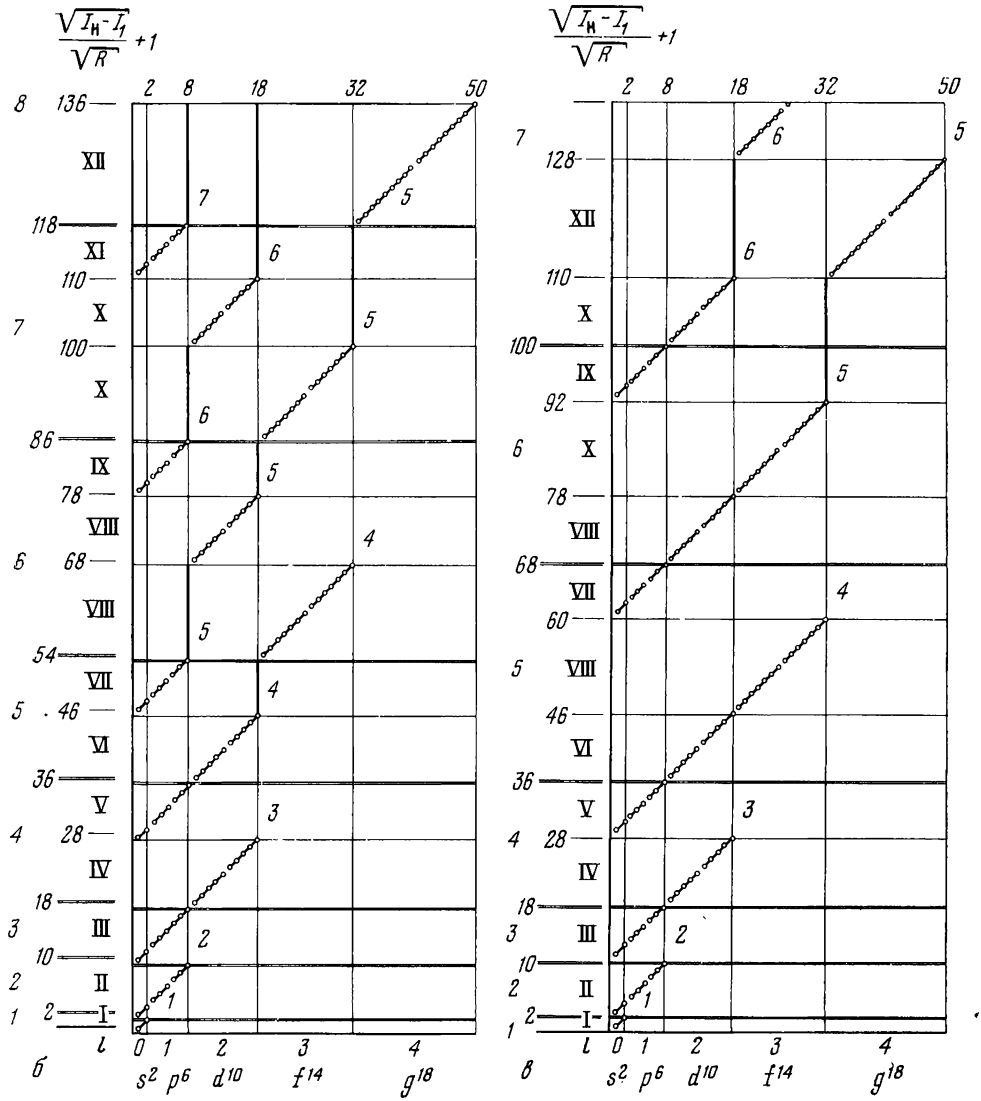


Рис. 7. Зависимость порядка заполнения безразмерных энергетических уровней $\frac{\sqrt{I_н - I_1}}{\sqrt{R}} + 1$ от главного n и азимутального l квантовых чисел

а — для нейтральных;
б — для частично ионизированных;
в — для сильно ионизированных атомов

Особенностью заполнения энергетических уровней является наличие перекрывания их для разных главных квантовых чисел n. Порядок заполнения оболочек получается следующим: вначале для n, равного 1 и 2, оно происходит подряд — без нарушений. Для $n = 3$ после заполнения $3s^2$- и $3p^6$-оболочек возникает первая конкуренция между электронами, заполняющими $4s^2$- и $3d^{10}$-оболочки, которые вследствие перекрывания находятся практически на одном и том же энергетическом уровне, т. е. на одной и той же горизонтали. По мере увеличения заряда ядра Z электроны, находившиеся до этого в $4s$-состоянии переходят в $3d$-состояние, а на их месте появляются новые $4s$-электроны. При этом энергетический уровень последних все время поднимается. Поэтому конкуренция между двумя оболочками продолжается с переменным успехом. Получается так, что при заполнении



$3d^{10}$-оболочки $4s^2$-оболочка как бы вытесняется ею все выше. Дальше показано, что в зависимости от конкретных рядов на рис. 6 в $4s^2$-оболочке может оставаться не только два, но и один электрон (например, для Cr).

Аналогичные явления наблюдаются у переходных металлов для $5s^2$- и $4d^{10}$-оболочек, которые также конкурируют одна с другой. $4d^{10}$-оболочка по мере заполнения постепенно вытесняет кверху конкурирующую с ней $5s^2$-оболочку. Разница будет только в том, что в последней под конец конкурентоспособным окажется только один, а не два электрона.

Дальнейший порядок заполнения оболочек ясен из рис. 7. Заполнение оболочек происходит с перерывами для VII, IX и XI рядов таблицы Менделеева. Эти s^2p^6-оболочки вклиниваются в разрывы без конкуренции. VIII и X ряды таблицы Менделеева, в которых содержится по 24 элемента, следует разбить на две неравные части в каждом (14 + 10). При заполнении 10 элементных частей происходит конкуренция между s^2- и d^{10}-электронами. При заполнении 14 элементных частей происходит тройное перекрывание и конкуренция s^2-, d^2- и f^{14}-оболочек.

Седьмой период таблицы Менделеева должен окончиться на 118 элементе, пока же он обрывается при $Z = 104$ (105). Восьмой должен быть характерен перекрыванием и конкуренцией сразу четырех $8s^2$-, $7d^2$-, $6f^3$- и $5g^{18}$-электронных оболочек. При заполнении 18-электронной g-оболочки остальные три будут постепенно вытесняться кверху. Так продолжится до окончания заполнения всех электронных оболочек для $n = 5$, т. е. до элемента с $Z = 136$.

По-видимому, дальше система элементов вообще не может быть продолжена, так как у следующего элемента с $Z = 137$ ближайшая к ядру электронная орбиталь не может образоваться.

Между диаграммами (см. рис. 5 и 7, *а*) существует явная аналогия. Чередование периодов и рядов таблицы элементов Менделеева на первой диаграмме отложено по оси абсцисс, а на второй — по оси ординат. Каждому пучку изоэлектронных рядов соответствует наклонная прямая на рис. 7, *а*, а точки на этих прямых отвечают самим изоэлектронным рядам. Величины главных квантовых чисел n на рис. 5 определяют тангенсы углов наклона асимптот к изоэлектронным рядам, а на рис. 7, *а* они отвечают номерам зигзагообразных линий, если вести счет снизу. Пересечения изоэлектронных рядов на рис. 5 соответствуют расположению энергетических уровней на одной горизонтали диаграммы рис. 7, *а*.

Сравнивая диаграмму рис. 7, *а* с таблицей Менделеева, заметим, что атомы элементов II и III периодов имеют аналогичные $2s^2p^6$- и $3s^2p^6$-оболочки. Точно так же IV и V периоды характеризуются практически почти одинаковым строением $4s^2$-, $3d^{10}$-, $4s^2p^6$- и $5s^2$-, $4d^{10}$-, $5s^2p^6$-электронных оболочек. Некоторая разница наблюдается только в числе s-электронов, конкурирующих с d-электронами. Такое же подобие наблюдается и в строении электронных оболочек VI и VII периодов. Числа электронов в соответствующих оболочках и числа элементов в периодах таблицы Менделеева равны (2, 8 и 8, 18 и 18, 32 и 32).

Описанная последовательность заполнения электронных оболочек относится к нейтральным атомам, когда суммарное число электронов равняется заряду атомного ядра Z. При этом, как видно на рис. 5, потенциалы ионизации для различных атомов сравнительно мало различаются. Это и приводит к перекрыванию энергетических уровней для разных квантовых чисел, к конкуренции различных электронов, а следовательно, и к ряду нарушений монотонной последовательности заполнения электронных оболочек.

Если при тех же числах электронов взять бóльшие заряды ядер, т. е. перейти от нейтральных атомов к положительным ионам для тех же изоэлектронных рядов, то разница в потенциалах ионизации для различных оболочек резко увеличится, что приведет к исчезновению ряда перекрываний и к значительному упрощению картины чередования энергетических уровней. Имея в виду, что все нарушения монотонного порядка заполнения электронных оболочек в основном имеют место для нейтральных и не более чем дважды ионизированных атомов, то рассматривая трижды и более ионизированные атомы, можно получить диаграмму (рис. 7, *б*).

Сопоставляя рис. 7, *а* и 7, *б*, заметим, что действительно порядок заполнения энергетических уровней существенно упростился и все мелкие нарушения для *s*- и *d*-электронов исчезли. Однако на диаграмме все же остались крупные перекрывания электронных оболочек, когда $5s^2p^6$-оболочка предшествует $4f^{14}$-оболочке, а $6s^2p^6$ целиком опережает $5f^{14}$. Однако если взять очень сильно ионизированные атомы, то это перекрывание также исчезнет (рис. 7, *в*). В результате картина заполнения электронных оболочек еще более упростится и приблизится к водородоподобной схеме. Вплоть до 92-го уранообразного изоэлектронного ряда перекрывания электронных оболочек вовсе не будет. Но дальше останется еще весьма крупное перекрывание, при котором $6s^2p^6d^{10}$-оболочки окажутся заполненными раньше, чем $5g^{18}$-оболочки. Устранить его путем перехода к еще бóльшим степеням ионизации, по-видимому, не удастся, так как для этого придется выйти далеко за пределы устойчивых элементов.

Надо полагать, что отсутствие в природе элементов с атомным номером $Z > 92$ связано не только с нестабильностью ядер таких атомов, но и в какой-то степени с упомянутой границей для заполнения без нарушений водородоподобной схемы всех электронных оболочек вплоть до $5f^{14}$ для сильно ионизированных атомов.

Рассмотрим теперь несколько подробнее вопрос о пересечении изоэлектронных рядов. Как было показано, такое пересечение впервые появляется для $Z = 19$, т. е. для калия.

Первые два электрона для 19-го изоэлектронного ряда находятся в $4s$-состоянии, а остальные — в $3d$-состоянии. Имея два значения потенциалов ионизации, можно вычислить только первую разность между ними Δ_1. Дальше этот изоэлектронный ряд обрывается, и потому непосредственно экстраполировать его не удается. Однако можно воспользоваться тем, что асимптоты всех изоэлектронных рядов при одном и том же значении квантового числа n практически параллельны. Поэтому мы можем принять для расчета 19-го изоэлектронного ряда просто среднее значение второй разности Δ_2 для всей $4s^2p^6$-электронной оболочки пятого ряда таблицы Менделеева. Это значение равняется 2,272 *эв*. Теперь мы можем экстраполировать наш изоэлектронный ряд в сторону бóльших значений Z, как это показано в табл. 15.

Проведем аналогичную экстраполяцию для 19-го изоэлектронного ряда в *d*-состоянии, но уже в сторону меньших значений Z. Для этого нам нужно будет вычислить значения первых разностей путем вычитания второй разности (18,49—3,22 = 15,27 *эв* и т. д.), а затем вычесть эти величины из экспериментальных значений потенциала ионизации (24,75—15,27 = 9,48 и т. д.). Вычисленные значения совместно с замеренными величинами потенциалов ионизации также поместим в табл. 15.

Нанося эти данные на рис. 8 заметим, что оба изоэлектронных ряда пересекаются между Z, равным 20 и 21. Для $Z = 19$ и $Z = 20$ с ядром прочнее будут

Таблица 15

Экстраполированные значения для потенциалов ионизации 19-го изоэлектронного ряда, *эв*

4*s*-состояние				3*d*-состояние			
Z	I_{19}	Δ_1	Δ_2	Z	I_{19}	Δ_1	Δ_2
19	4,339	7,529	—	19	(—2,57)	(12,05)	—
20	11,868	(9,801) *	(2,272)	20	(9,48)	(15,27)	(3,22)
21	(21,669)	(12,173)	(2,272)	21	24,75	18,49	(3,22)
22	(33,842)		(2,272)	22	43,24		(3,22)

* В скобках даны экстраполированные значения.

связаны 4*s*-электроны (потенциалы ионизации для них больше), а для $Z = 21$ и более связь будет сильнее уже для электронов, находящихся в 3*d*-состоянии. Вот почему первые два члена 19-го изоэлектронного ряда будут замещены 4*s*-электронами, а остальные его члены — 3*d*-электронами. Это и есть та конкуренция электронов, о которой уже упоминалось.

Производя аналогичную экстраполяцию для других изоэлектронных рядов переходных металлов, можно убедиться, что и для них имеет место пересечение изоэлектронных рядов разных оболочек.

Значительно сложнее происходит пересечение $5s^2p^6$ — $4f^{14}$- и $6s^2p^6$ — $5f^{14}$-электронных оболочек у сильно ионизированных атомов. Поскольку экспериментальные данные о потенциалах ионизации в этой области полностью отсутствуют, о пересечении рядов можно судить только по их взаимному положению и наклону. На рис. 9 показана схема такого пересечения для $5s^2p^6$- и $4f^{14}$-оболочек. По оси абсцисс отложены атомные номера Z, а по оси ординат — корни квадратные из потенциалов ионизации (так же, как и на рис. 5). Для сильно ионизированных атомов изоэлектронные ряды практически сливаются со своими асимптотами, и потому мы изобразим их прямыми линиями. Чтобы сделать чертеж более наглядным, на нем существенно увеличена разница в углах наклона пересекающихся изоэлектронных рядов. Для упрощения схемы все ряды начинаются с оси абсцисс и условно проведены на одинаковых расстояниях один от другого.

На рисунке видно, что при возрастании атомных номеров Z пучок изоэлектронных рядов для $5s^2p^6$-оболочки, соответствующий седьмому ряду таблицы Менделеева, появляется раньше, чем пучок рядов $4f^{14}$-оболочки. Однако последний идет круче предыдущего и потому продолжения этих пучков в глубине атома неизбежно должны пересечься.

Продолжение каждого из изоэлектронных рядов $4f^{14}$-оболочки после пересечения с изоэлектронными рядами $5s^2p^6$-оболочки сдвигается на один атомный номер по горизонтали вправо и на восемь интервалов по вертикали вверх. В $4f^{14}$-оболочке появляется «разрыв», в котором размещаются отрезки изоэлектронных рядов $5s^2p^6$-оболочки, каждый из которых содержит по восьми членов. Эти отрезки сдвигаются последовательно все правее и правее. После окончания пересечения получается, что все $4f^{14}$-ряды сближаются с $4d^{10}$-рядами, а $5s^2p^6$-ряды с $5d^{10}$-рядами, т. е. схема оболочек становится водородоподобной.

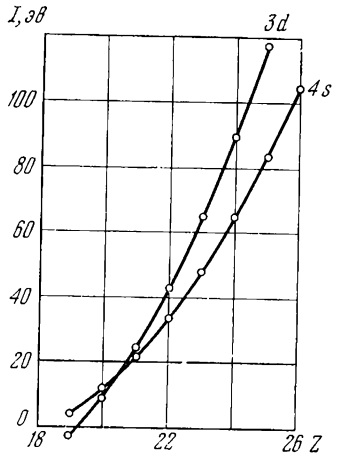
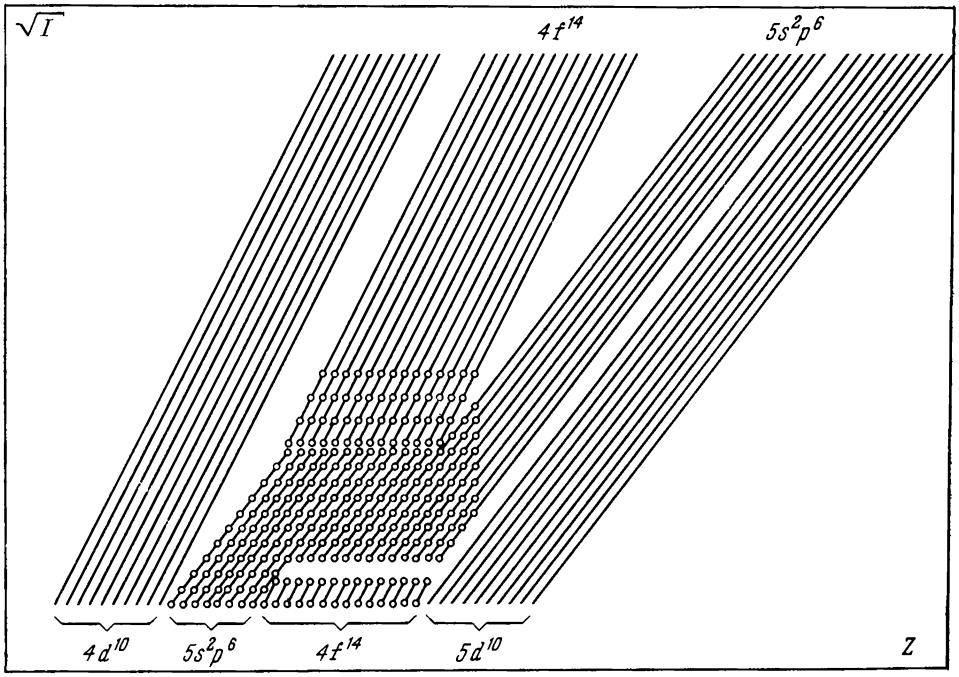


Рис. 8. Пересечение кривых потенциалов ионизации I_{19} для $4s$- и $3d$- квантовых состояний

Рис. 9. Схема пересечения $5s^2p^6$- и $4f^{14}$- изоэлектронных рядов при высоких степенях ионизации



При пересечении реальных изоэлектронных рядов, идеализированная картина, показанная на рис. 9, несколько деформируется, но общий характер пересечения оболочек сохраняется.

Параметры изоэлектронных рядов

Вернемся теперь к формулам (2) — (6), выведенным для изоэлектронных рядов, и, пользуясь ими, вычислим по опытным данным тангенсы углов наклона асимптот к изоэлектронным рядам $\operatorname{tg}\alpha$ и величины экранирующих зарядов $b/2$ для каждого ряда. Для тех изоэлектронных рядов, для которых

первые члены ряда относятся к другой электронной оболочке, вычисления будем выполнять только для основных членов [3].

Анализируя данные таблицы 16, необходимо заметить следующее. В пределах каждого из первых трех периодов таблицы Менделеева величины тангенсов углов наклона асимптот к изоэлектронным рядам колеблются незначительно. Коэффициент вариации составляет для первого периода всего 0,04, для второго — 0,24 и для третьего — 1,66%. Поэтому в первом приближении $\operatorname{tg}\alpha$ могут быть с достаточной для практики точностью приняты постоянными для каждого пучка изоэлектронных рядов. Вывод этот основывается на опытных данных высокой точности для первых 18 изоэлектронных рядов, полученных более чем по 200 потенциалам ионизации, и поэтому может считаться достаточно надежным.

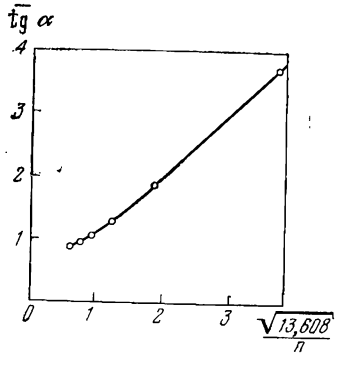


Рис. 10. Зависимость угловых коэффициентов асимптот к изоэлектронным рядам $\operatorname{tg}\alpha \equiv \sqrt{\frac{\Delta_2}{2}}$ от $\frac{\sqrt{13{,}608}}{n}$

Есть основания полагать, что усредненные значения тангенсов углов наклона асимптот $\overline{\operatorname{tg}\alpha}$ для изоэлектронных рядов, общие для всего III периода, будут более правильными, чем их частные значения.

Для остальных рядов и периодов таблицы Менделеева также наблюдается приблизительное постоянство тангенсов углов наклона асимптот к изоэлектронным рядам в пределах каждого пучка (группы). Однако отклонения значений $\operatorname{tg}\alpha$ от их средних величин получаются значительно бóльшими. Это объясняется меньшим числом обрабатываемых опытных данных и существенно меньшей их точностью.

Нанося на диаграмму рис. 10 опытные значения $\frac{\sqrt{13{,}608}}{n}$ и $\overline{\operatorname{tg}\alpha}$ из табл. 16, заметим, что с ростом главного квантового числа n средние значения $\overline{\operatorname{tg}\alpha}$ убывают медленнее, чем обратно пропорционально n. Это явление уже нельзя объяснить только меньшей точностью опытных данных. Необходимо учесть влияние и релятивистских поправок.

Анализируя разности экранирующих зарядов для аналогичных электронных оболочек, мы установили, что они приблизительно постоянны. Это позволило найти отсутствующие значения экранирующих зарядов $b/2$ путем экстраполяции [3].

Сводка опытных и экстраполированных (в скобках) значений экранирующих зарядов $b/2$ приведена в табл. 17.

Наиболее грубой является экстраполяция экранирующих зарядов в область $4f^{14}$- и $5f^{14}$-электронных оболочек. Она осуществлена путем учета примерного постоянства дефектов экранировки для первого и последнего изоэлектронного ряда в каждом их пучке (группе). Промежуточные значения экранирующих зарядов определены путем линейной интерполяции. Хотя вычисления и проведены нами до вторых знаков после запятой, однако вероятная точность окончательных величин в последних двух строках таблицы составляет только целые единицы.

Вследствие чрезвычайной сложности спектров лантанидов и актинидов исследователям пока не удалось определить экспериментальным путем по-

Таблица 16

Тангенсы углов наклона асимптот к изоэлектронным рядам

n	$\frac{\sqrt{13{,}608}}{n}$	N	tg α	$\overline{\text{tg}\,\alpha}$	n	$\frac{\sqrt{13{,}608}}{n}$	N	tg α	$\overline{\text{tg}\,\alpha}$
1	3,689	1—2	3,689—3,691	3,689	4	0,922	29—46	0,890—1,310	1,046
2	1,844	3—10	1,850—1,864	1,855	5	0,738	47—78	0,910—1,210	0,966
3	1,230	11—28	1,260—1,300	1,269	6	0,615	79—82	0,830—0,950	0,895

Таблица 17

Экранирующие заряды $b/2$

Оболочка	N (от — до)	Значение экранирующих зарядов для групп изоэлектронных рядов														
$1s^2$	1—2	0,000	0,628													
$2s^2p^6$	3—10	1,637	2,199	3,163	3,835	4,509	5,345	6,062	6,760							
$3s^2p^6$	11—18	8,425	9,029	10,298	10,904	11,486	12,323	12,960	13,509							
$4s^2p^6$	29—36	24,82	25,42	26,96	27,59	28,16	29,08	29,69	30,33							
$5s^2p^6$	47—54	42,51	43,22	44,77	45,60	46,17	47,10	47,75	(48,16)							
$6s^2p^6$	79—86	73,54	74,32	75,92	76,69	(77,26)	(78,16)	(78,84)	(79,25)							
$3d^{10}$	19—28	15,75	16,08	17,07	(18,28)	19,16	(20,18)	(20,68)	(21,42)	(22,17)	23,47					
$4d^{10}$	37—46	33,18	33,50	(34,36)	35,57	(36,45)	37,47	37,97	38,71	39,46	40,49					
$5d^{10}$	69—78	(64,62)	(64,94)	(65,80)	(65,81)	(67,89)	(68,91)	(69,41)	(70,15)	(70,90)	71,93					
$4f^{14}$	55—68	(50,99)	(51,87)	(52,75)	(53,63)	(54,51)	(55,39)	(57,27)	(57,14)	(58,02)	(58,90)	(59,78)	(60,66)	(61,54)	(62,41)	
$5f^{14}$	87—100	(82,63)	(83,51)	(84,39)	(85,27)	(86,15)	(87,03)	(87,90)	(88,78)	(89,66)	(90,54)	(91,42)	(92,30)	(93,18)	(94,05)	

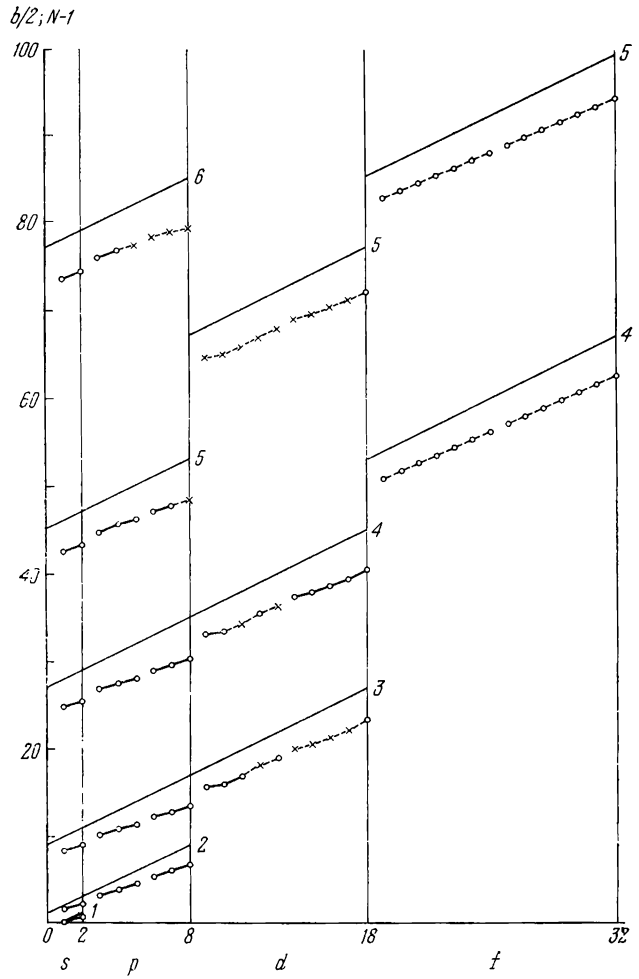


Рис. 11. Нарастание чисел электронов $N - 1$ и экранирующих зарядов $b/2$

тенциалы ионизации для $4f^{14}$- и $5f^{14}$-электронных конфигураций. Поэтому даже приведенный ориентировочный расчет экранирующих зарядов для этих оболочек может оказаться полезным.

Данные табл. 17 нанесены на график рис. 11. Сплошными линиями указано нарастание числа экранирующих электронов, равного $N - 1$, а ломаными — изменение значений экранирующих зарядов $b/2$. Разница между ними дает дефект экранировки. Опытные значения нанесены кружками, а экстраполированные — крестиками.

Имея данные об экранирующих зарядах $b/2$ и тангенсах углов наклона асимптот к изоэлектронным рядам $\operatorname{tg}\alpha$, можно построить общую идеализированную схему взаимного расположения этих рядов (рис. 12).

По оси абсцисс отложим атомные номера элементов Z вплоть до гипотетического $Z = 136$ и отметим величины экранирующих зарядов $b/2$. Через эти точки проведем прямые линии под углами, тангенсы которых равны $\overline{\operatorname{tg}\alpha}$. По оси ординат будем откладывать квадратные корни из потенциалов ионизации $\sqrt{I}$. При этом мы пренебрежем разницей между самими изоэлектрон-

ными рядами и их асимптотами. Для упрощения общей картины отвлечемся от некоторой неравномерности расстояний между асимптотами в пределах каждой группы изоэлектронных рядов (см. рис. 5).

Точно так же на этой упрощенной схеме не будем указывать пересечения изоэлектронных рядов у их нижних концов вследствие конкуренции s- и d-электронов. Такая схема дает наглядное представление о строении электронных оболочек главным образом в глубине атомов.

В нижней части рис. 12 отмечены границы рядов и периодов таблицы элементов Менделеева и приведены символы электронных оболочек для соответствующих групп (пучков) изоэлектронных рядов. На диаграмме хорошо видно упоминавшееся пересечение $5s^2p^6$- и $4f^{14}$-, а также $6s^2p^6$- и $5f^{14}$-электронных оболочек.

Описанный способ расчета величин экранирующих зарядов $b/2$ является эмпирическим. Попытаемся теперь определить их приближенные значения теоретическим путем.

Распространенная гипотеза о сферической симметрии всех электронных оболочек, при которой заряды электронов считаются равномерно распределенными вокруг ядра, приводит к существенному завышению теоретических экранирующих зарядов $N - 1$ по сравнению с их опытными значениями $b/2$ (см. рис. 11). Объяснений скачкообразному изменению $b/2$ нет. Не существует и приемлемого способа расчета экранирующих зарядов с учетом угловой составляющей волновой функции. Поэтому мы отказываемся от предположения о сферической симметрии электронных оболочек и предлагаем в качестве первого приближения базироваться на представлении о концентрации зарядов электронов (электронных облаков) по углам симметричных многоугольных фигур. При этом в отличие, например, от Ленгмюра [22] будем считать эти фигуры не статическими, а динамическими. Предположение о симметричных электронных конфигурациях базируется на том, что потенциальная энергия взаимного отталкивания электронов достигает минимального значения при симметричном их расположении.

Подробный расчет экранирующих зарядов для первых десяти изоэлектронных рядов приведен в нашей работе [3]. Для иллюстрации метода такого расчета здесь дадим только два примера.

Для шестого углеродообразного ядра экранирующий заряд от внутренней двухэлектронной сферически-симметричной $1s^2$-электронной оболочки будет равен 2. Четыре внешних электрона, отталкиваясь один от другого, будут стремиться расположиться как можно дальше, т. е. по углам тетраэдра. При этом расстояние между ними станет в $2\sqrt{2}/\sqrt{3} = 1{,}634$ раза больше расстояния их от ядра. Каждый из этих внешних электронов будет экранироваться двумя внутренними и тремя внешними. Потенциальная энергия внешнего электрона в поле ядра и пяти экранирующих электронов будет равна

$$\frac{1}{r}\left[Z - 2 - \frac{3\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}\right].$$

Следовательно, экранирующий заряд получится равным

$$\frac{b}{2} = 2 + \frac{3\sqrt{3}}{2\sqrt{2}} = 3{,}837.$$

Опытное значение экранирующего заряда (3,835) отличается от расчетного меньше чем на 0,1%.

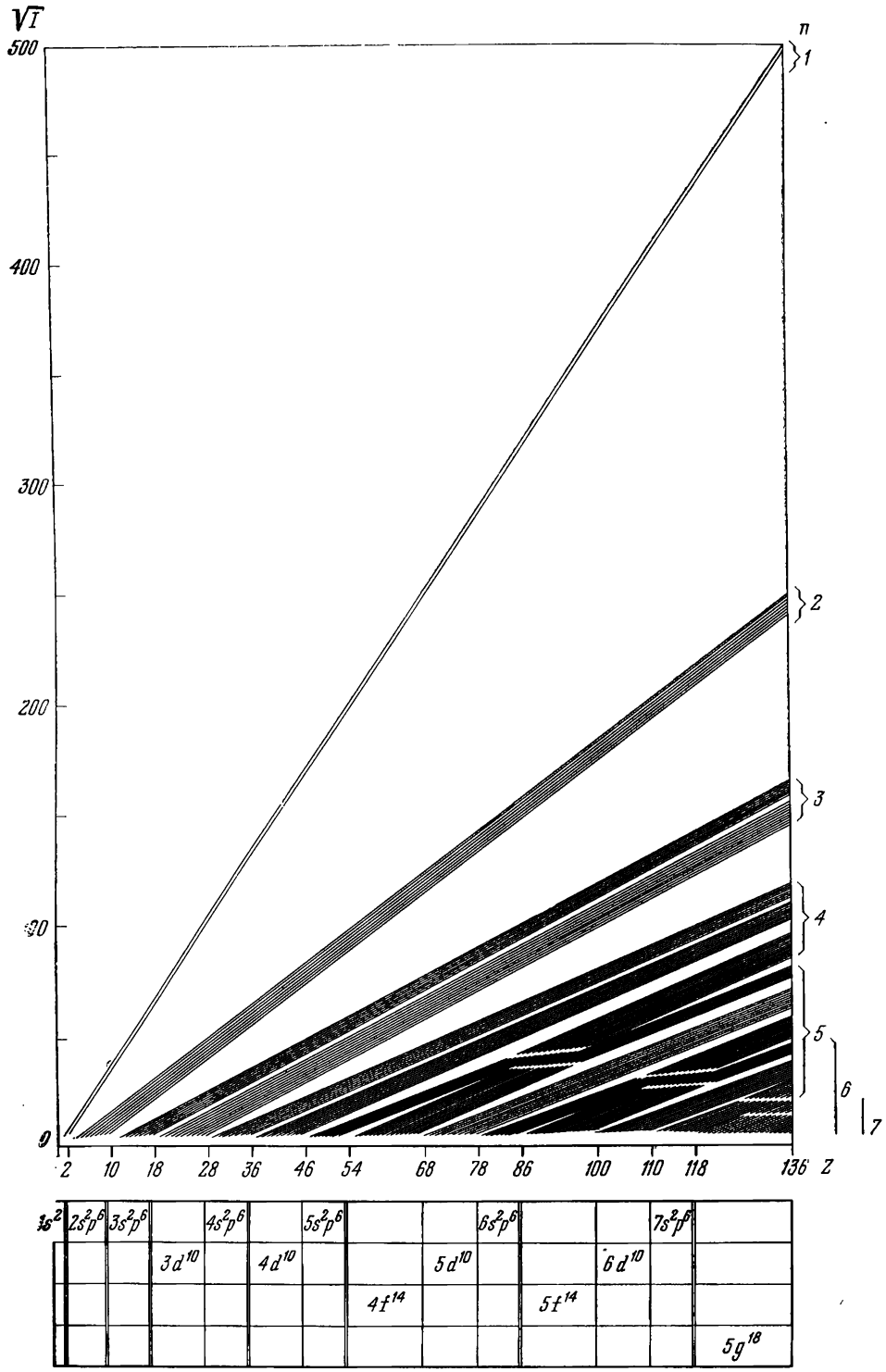


Рис. 12. Схема расположения изоэлектронных рядов

Для восьмого кислородообразного изоэлектронного ряда два электрона сферически-симметричной внутренней $1s^2$-оболочки создадут экранирующий заряд, равный 2. Шесть внешних электронов, отталкиваясь один от другого, будут стремиться к углам октаэдра. Пять из них будут экранировать от ядра шестой электрон.

Как известно, сторона октаэдра в $\sqrt{2}$ раз больше расстояния от его центра до любой вершины. Следовательно, и расстояния между смежными электронами будут $\sqrt{2}$ раза больше расстояния их от ядра. Таких экранирующих электронов четыре. Пятый будет отстоять от рассматриваемого электрона на расстоянии $2r$. Потенциальная энергия электрона в совместном поле ядра и остальных семи экранирующих электронов составит

$$\frac{1}{r}\left[Z-2-\frac{4}{\sqrt{2}}-\frac{1}{2}\right].$$

Следовательно, экранирующий заряд для этого случая $\frac{b}{2}=2+\frac{4}{\sqrt{2}}+\frac{1}{2}=$ $=5{,}328$. Опытное значение его 5,345, что дает разницу в 0,3%.

Таким образом, допуская, что электроны в оболочке атомов располагаются по углам симметричных фигур и потому расстояния от одного из них до других электронов будет больше, чем до ядра, можно понять, почему экранирующий заряд получается меньше арифметической суммы зарядов экранирующих электронов.

Схемы симметричных электронных оболочек для первых десяти изоэлектронных рядов изображены на рис. 13 [3], а расчетные и опытные данные сведены в табл. 18.

Таблица 18

Расчетные и опытные значения экранирующих зарядов

Номер ряда	Расчетные		Эмпирические	Ошибка, %
	пределы изменения	средние		
1	0,000	0,000	0,000	0,0
2	0,500—0,750	0,625	0,628	0,5
3	1,600—1,713	1,656	1,637	1,1
4	1,914—2,440	2,177	2,199	1,0
5	3,155	3,155	3,163	0,3
6	3,837	3,837	3,835	0,1
7	4,522	4,522	4,509	0,3
8	5,328	5,328	5,345	0,3
9	6,131	6,131	6,062	1,1
10	6,935	6,935	6,760	2,5
Среднее				1,2

Как видим, расчетные значения экранирующих зарядов получаются весьма близкими к эмпирическим. Это показывает, что представление о симметричных многоугольных электронных оболочках дает возможность не

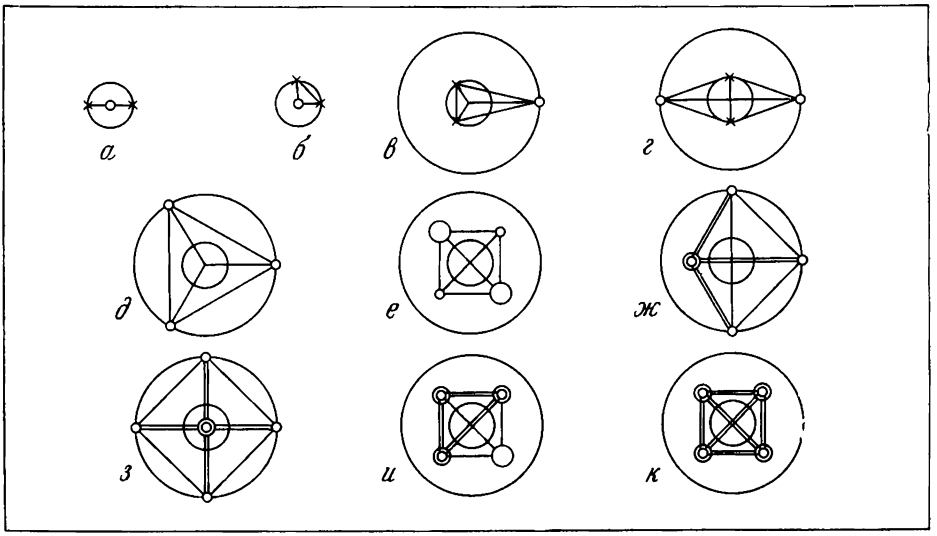


Рис. 13. Различные схемы симметричного расположения электронов для расчетов экранирующих зарядов
а — двух максимально удаленных электронов: *б* — двух электронов в среднем положении; *в* — трех электронов (2 + 1); *г* — четырех (2 + 2); *д* — пяти (2+3); *е* — шести (2 + 4); *ж* — семи (2 + 5); *з* — восьми (2 + 6); *и* — девяти (2 + 7); *к* — десяти (2 + 8) электронов

только объяснить причину существования дефекта экранировки, но и довольно точно рассчитать его величину.

Анализируя полученные результаты, необходимо сделать некоторые замечания.

1. Величина экранирующих зарядов, характеризуемых $\bar{b}/2$, составляет значительную долю от зарядов ядра Z. Так, для электронных оболочек концов периодов таблицы Менделеева (см. табл. 16) получаются следующие результаты:

Z	$\bar{b}/2$	% от Z	$Z-\bar{b}/2$	Z	$\bar{b}/2$	% от Z	$Z-\bar{b}/2$
2	0,626	31	1,372	36	30,33	84	5,67
10	6,760	67	3,249	54	48,16	86	5,84
18	13,509	75	4,491	86	(79,25)	(92)	(6,75)

Согласно нулевому приближению, взаимодействие электронов не учитывается, т. е. считается, что на каждый электрон действует полный заряд ядра Z. Фактически же на него действует эффективный заряд $Z - b/2$. Таким образом, получается ошибка в сторону преувеличения действующего заряда от 1,4 раза для $Z = 2$ до 12,8 раза для $Z = 86$, что совершенно недопустимо. Поэтому нулевое приближение должно быть отвергнуто.

Согласно другой распространенной гипотезе о сферически-симметричном распределении электронов, экранирующий заряд принимается равным $N - 1$, что у нейтральных атомов при $Z = N$ во всех случаях дает для внешних электронов эффективный заряд, равный единице. Это приводит к ошибке в 1,4—6,7 раза. По этой гипотезе для проникающих орбит считается, что часть времени на такие электроны действует полный заряд ядра Z, но способа определения длительности такого действия не приводится. Потому она также не может быть признана приемлемой.

2. Несмотря на приближенный (учет только электростатических взаимодействий) и элементарный характер предлагаемого расчетного метода определения величин экранирующих зарядов $b/2$, в девяти случаях из десяти расчетные значения отличаются от опытных не более чем на 1,1% (при средней квадратичной ошибке 0,7%). Только в одном случае максимальная ошибка достигает 2,5% от опытной величины $b/2$, что не идет ни в какое сравнение с ошибками упоминавшихся гипотез. Такое близкое совпадение расчетных и опытных данных свидетельствует о том, что лежащая в основе этого расчета схема симметрично-многоугольного расположения электронов вокруг ядра (вследствие их взаимного отталкивания) в основном правильно отражает объективную реальность. Предлагаемый метод расчета экранирующих зарядов позволяет реально объяснить причину неравномерного, ступенчатого нарастания экранирующих зарядов $b/2$ при возрастании Z (см. рис. 5) изменением формы этих многогранников.

3. Для всех изоэлектронных рядов заряд ядра получается больше величины экранирующего заряда ($Z > N - 1 > b/2$). Из этого обстоятельства вытекают важные следствия.

Для нейтральных атомов ($Z = N$), а тем более для положительных ионов ($Z > N$) взаимное электростатическое отталкивание электронов недостаточно для предотвращения падения каждого из них на ядро. А раз электроны не падают на него и атом продолжает существовать, значит, они подвергаются еще и действию центробежных сил, т. е. движутся вокруг ядра. Поэтому описанные симметричные многоугольные схемы взаимного расположения электронов являются не статическими, как это принималось ранее в некоторых гипотезах (например, у Ленгмюра [22] или Люиса [23]), а динамическими. Электроны движутся вокруг ядра, циклически образуя описанные симметричные фигуры. При этом взаимное расположение электронов будет периодически повторяться. Рассчитанные и замеренные величины экранирующих зарядов являются не фиксированными, а только средними статистическими значениями.

Не только у положительных ионов ($Z > N$), но и у так называемых нейтральных атомов ($Z = N$) на расстояниях одного порядка, что и размеры электронных оболочек, суммарное поле ядра и электронов в ряде мест положительное. Поэтому даже нейтральные атомы способны притягивать к себе дополнительные электроны, а следовательно, образовывать устойчивые отрицательные ионы и соединяться с другими атомами в молекулы и кристаллы. При отсутствии сферической симметрии арифметическое равенство $Z = N$ не обеспечивает геометрической нейтральности атома из-за разности расстояний от любой точки в окрестностях атома до ядра и электронов. Только вдали от атома эта разница становится относительно небольшой, и потому он ведет себя как нейтральный. Наличие положительных участков поля вокруг ядра при $Z = N$ позволяет рационально объяснить существование межмолекулярных сил Ван-дер-Ваальса, сродства к электрону, водородных связей, адгезионных сил и других подобных взаимодействий.

4. Отталкивание электронов имеет место не только в пределах каждой данной оболочки, но и между оболочками. Внутренние оболочки экранируют внешние, а внешние — экранируют внутренние. Именно этим можно объяснить разницу энергии электрона, отрываемого с поверхности иона (когда внешние оболочки отсутствуют), и электрона, вырываемого из внутренних частей электронных оболочек, а при возвращении на место дающего рентгеновское излучение.

Уточненные данные по изоэлектронным рядам

Все приведенные расчеты выполнены в первом приближении по параболическим уравнениям, так же как это было сделано в наших работах [3, 24]. Параболические уравнения второй степени получаются, если при использовании метода последовательных разностей принять, что вторые разности для потенциалов ионизации являются постоянными, и пренебречь всеми отклонениями от средних значений, считая их случайными ошибками экспериментов. Однако на самом деле, эти отклонения дают систематическую разницу, и потому пренебрегать ими нельзя. Кроме того, как это видно на рис. 10, вторые разности и вычисленные на их основе тангенсы углов наклона асимптот для изоэлектронных рядов отличаются от теоретических значений, полученных из квантовой механики. Чем больше величина главного квантового числа n, тем существеннее разница.

В приведенных подсчетах не учитывались релятивистские поправки, которые при больших Z становятся достаточно существенными. Все это приводит нас к выводу о необходимости учета подобных отклонений.

Такая работа была выполнена А. А. Савельевым [16, 17, 18]. Количество опытных данных, собранных им, было существенно увеличено. Кроме того, цифры, взятые из литературы, подвергались проверке и сопоставлению с данными других исследователей. Если в работах использовались устаревшие и несравнимые между собой значения мировых констант, производился пересчет для корректировки данных.

Вместо параболической формулы (3)

$$I_N'' = \frac{\Delta_2}{2}\left[\left(Z-\frac{b}{2}\right)^2 - \left(N-\frac{b}{2}\right)^2\right] + I_1$$

А. А. Савельев предложил следующую формулу для потенциалов ионизации I_N каждого изоэлектронного ряда:

$$I_N^K = \frac{13{,}6}{n^2}[(Z-b)^2 - (N-1-b)^2] + Be^{-\alpha K} - \Delta + E^{\mathrm{rel}}$$

или

$$I_N^K = \frac{13{,}6}{n^2}(Z-b)^2 - \left[\frac{13{,}6}{n^2}(N-1-b)^2 + \Delta\right] + Be^{-\alpha K} + E^{\mathrm{rel}}, \qquad (7)$$

где N — номер изоэлектронного ряда или полное число электронов в оболочке атома или иона; $K = Z - N + 1$ — номер потенциала ионизации в ряду; Z — атомный номер элемента, b — экранирующий заряд, B, α, Δ — коэффициенты, постоянные для каждого изоэлектронного ряда.

Сопоставляя обе формулы: параболическую (3) и уточненную (7) — необходимо отметить следующее:

В параболической формуле коэффициент пропорциональности зависит от теоретической величины $13{,}608/n^2$, но не равен ей (см. табл. 16 и рис. 10). Таким образом, здесь приходится вместо действительного целого квантового числа n пользоваться уменьшенным эффективным его значением, что приводит к увеличению тангенса угла наклона асимптоты к кривой для изоэлектронного ряда против теоретического. В формуле (7) используется действительное целое значение главного квантового числа n. Таким образом, коэффициент $13{,}6/n^2$ поддается теоретическому расчету и не искажает роли главного квантового числа n.

В формуле (3) фигурирует экранирующий заряд, равный $b/2$, а в формуле (7) — b. Это просто разные обозначения для экранирующего заряда. Однако из-за того, что значения коэффициентов пропорциональности перед скобками в обеих формулах различны, величины экранирующих зарядов несколько различаются.

Главный член для изоэлектронного ряда $\frac{13{,}6}{n^2}(Z-b)^2$ имеет смысл водородоподобного члена, но в нем вместо полного заряда ядра Z фигурирует эффективный заряд ядра $(Z-b)$, экранированного всеми электронами оболочки, кроме одного, который удаляется из атома в процессе ионизации.

В обеих формулах существует некоторый, не зависимый от Z, постоянный для каждого изоэлектронного ряда член. Для параболической формулы он равен

$$-\frac{\Delta_2}{2}\left(N-\frac{b}{2}\right)^2+I_1,$$

а для формулы (7)

$$-\frac{13{,}6}{n^2}(N-1-b)-\Delta.$$

Как видим, в обоих случаях этот член является функцией числа электронов в оболочке.

В формуле (3) фигурирует полное число электронов N, а в (7) — уменьшенное $(N-1)$. Поскольку в экранировке ядра для каждого из электронов участвуют остальные $(N-1)$ электроны, следует отдать предпочтение предложенному А. А. Савельевым выражению.

Физический смысл всего не зависимого от Z постоянного члена обеих формул по-прежнему заключается в том, что при удалении из оболочки одного из электронов он перестает отталкивать от себя прочие $(N-1)$ электроны. Поэтому они имеют возможность приблизиться к ядру и перестроить электронную оболочку. Изменение числа электронов в оболочке приводит к изменению ее симметрии и формы, а значит, и взаимных расстояний между электронами. В результате у остающихся электронов появляется избыток энергии, который они и передают удаляемому электрону, облегчая его ионизацию. Таким образом, постоянный член в формулах для потенциалов ионизации зависит от формы электронных оболочек.

В формуле (7) имеются два дополнительных члена: $\mathrm{Be}^{-\alpha K}$ и E^{rel}, которые в явном виде в параболической формуле (3) отсутствуют.

Экспотенциальный член $\mathrm{Be}^{-\alpha K}$ быстро спадает вдоль каждого изоэлектронного ряда с ростом степени ионизации K или, что то же самое, с ростом заряда Z. Физический смысл этого члена еще недостаточно ясен. По-видимому, он появляется вследствие того, что с ростом заряда ядра Z размеры электронных оболочек для разных главных квантовых чисел n уменьшаются в неодинаковой степени, что нарушает подобие оболочек.

Релятивистский член E^{rel}, наоборот, быстро растет с увеличением степени ионизации K или с ростом заряда ядра Z. При этом скорость электрона v возрастает пропорционально Z. Но с ростом v одновременно увеличивается и масса электронов

$$m=\frac{m_0}{\sqrt{1-v^2/c^2}}.$$

Возрастание массы в свою очередь приводит к росту кинетической и общей энергии электронов.

Обычно в спектроскопии выражение для релятивистских поправок дается в виде нескольких первых членов степенного ряда по Z, в который раскладывается это выражение. А. А. Савельев принял

$$E^{\text{rel}} = \gamma_3 Z^3 + \gamma_4 Z^4 + \gamma_8 Z^8.$$

Если дважды продифференцировать выражение (7) по Z, то постоянные его слагаемые исчезнут, степень уравнения понизится на две единицы, а экспотенциальный член останется, но только с другим коэффициентом пропорциональности. В результате для второй разности мы получим теоретическую постоянную величину $13{,}6/n^2$ и две поправки к ней: экспотенциальную, убывающую с ростом Z, и релятивистскую, возрастающую с увеличением Z. Суммарная кривая будет иметь минимум, превышающий теоретическое значение $13{,}6/n^2$ тем сильнее, чем больше будет номер изоэлектронного ряда N. Этим и объясняется то, что при вычислении усредненного значения второй разности $\Delta_2/2$ для параболической формулы получаются значения, превышающие теоретическую величину этого коэффициента (см. рис. 10).

В параболической формуле (3) имеется только три эмпирических коэффициента для каждого изоэлектронного ряда: $\Delta_2/2$, $b/2$ и I_1. А в уточненной формуле (7) число их увеличивается до шести, что позволяет примерно на два порядка повысить точность вычисления. Это дает возможность обнаружить среди эмпирических значений отдельных потенциалов ионизации случайные ошибки и устранить их.

Полученные А. А. Савельевым уточненные значения потенциалов ионизации сведены в табл. 19.

Нулевой потенциал ионизации получен путем экстраполяции уравнений изоэлектронных рядов в нижнюю сторону. Значения потенциалов ионизации для каждого изоэлектронного ряда в электронвольтах расположены в таблице по диагонали сверху вниз и слева направо. Ступенчатыми линиями указаны границы отдельных электронных оболочек.

Извлечем из приведенных значений потенциалов ионизации квадратные корни и нанесем полученные результаты на рис. 14 по оси ординат, а по оси абсцисс — отложим атомные номера элементов Z. Все точки для s-электронов обозначим черными кружками, а остальные — белыми. На этой же диаграмме нанесем перечеркнутыми кружками значения нулевых потенциалов ионизации или электронного сродства. Все точки, относящиеся к одному и и тому же изоэлектронному ряду, соединим сплошными линиями. Продолжения изоэлектронных рядов в сторону электронного сродства показаны пунктирными линиями.

Сопоставляя рис. 14 с аналогичным рис. 9 в нашей предыдущей монографии [3], легко заметить, что число опытных данных теперь существенно увеличилось.

Вычисленные А. А. Савельевым значения коэффициентов уравнений для каждого изоэлектронного ряда сведены в табл. 21. По вертикали отложены номера изоэлектронных рядов или числа электронов в соответствующей оболочке, а по горизонтали — обозначения соответствующих коэффициентов.

Анализируя данные табл. 19, необходимо сделать следующие замечания.

Значения электронного сродства в табл. 19 вычислены по формуле (7), т. е. с учетом экспотенциального члена и релятивистских поправок. Экстраполяция выполнена для каждого изоэлектронного ряда, а также путем вы-

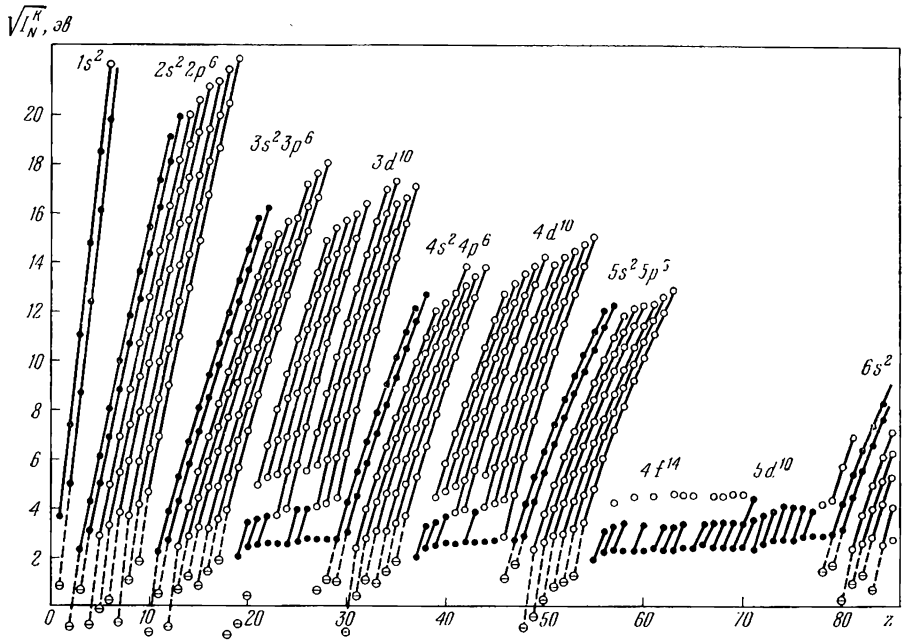


Рис. 14. Уточненная зависимость $\sqrt{I_N^K}$ от атомных номеров элементов Z

числения разностей между потенциалами ионизации данного ряда и потенциалами ионизации наиболее изученных первых и последних изоэлектронных рядов каждой электронной оболочки.

Аналогичный прием использован в статьях Ю. В. Зефирова и наших [25—28]. В них за основу взят упорядоченный массив потенциалов ионизации из работы Лотца [15]. Используя первые пять потенциалов ионизации, удалось вычислить значения четвертых разностей, которые принимались постоянными. При этом экстраполяционная формула получала вид полинома четвертой степени. Вычисления производились для каждого изоэлектронного ряда в отдельности и для разности двух смежных изоэлектронных рядов, а также для разности потенциалов ионизации рассматриваемого и крайнего изоэлектронного ряда данной оболочки.

В табл. 20 сведены для сравнения данные об электронном сродстве атомов первых трех периодов таблицы Менделеева.

Анализируя эту таблицу, необходимо отметить следующее.

Опытные данные об электронном сродстве весьма немногочисленны и отличаются сильным разбросом величин. Отрицательное электронное сродство непосредственным экспериментом определить не удается. Расчетные данные для электронного сродства, полученные описанными способами, колеблются в существенно более узких пределах. Расчетом удается определить даже отрицательное электронное сродство. Учитывая, что опытных данных мало и они довольно грубы и противоречивы, следует полагать, что получение экстраполированных данных по электронному сродству является безусловно полезным.

Таблица 19

Потенциалы ионизации атомов и ионов, *эв*

Z	Элемент	Номер потенциала ионизации											Оболочка
		0	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII	IX	X	
1	H	0,739	13,598										
2	He	−0,622	24,587	54,416									
3	Li	0,439	5,392	75,638	122,451								
4	Be	−0,490	9,922	18,211	153,893	217,713							
5	B	0,020	8,298	25,154	37,930	259,368	340,217						
6	C	0,99	11,260	24,383	47,887	64,492	392,077	489,981					
7	N	−0,40	14,534	29,601	47,448	77,472	97,888	552,057	667,029				
8	O	1,125	13,618	35,116	54,934	77,412	113,896	138,116	739,315	871,387			
9	F	3,25	17,422	34,910	62,707	87,138	114,240	157,161	185,182	953,886	1103,089		
10	Ne	−0,924	21,564	40,962	63,45	97,110	126,21	157,93	207,27	239,09	1195,797	1362,164	ls^2
11	Na	0,29	5,139	47,286	71,64	98,91	138,390	172,15	208,47	264,18	299,87	1465,091	
12	Mg	−0,62	7,646	15,035	80,143	109,24	141,26	186,500	224,94	265,90	327,95	367,53	
13	Al	0,52	5,986	18,828	28,447	119,99	153,71	190,47	241,43	285,59	330,21	398,57	
14	Si	1,66	8,151	16,345	33,492	45,141	166,77	205,05	246,52	303,17	351,10	401,43	
15	P	0,73	10,486	19,725	30,180	51,37	65,023	220,43	263,22	309,41	371,73	424,50	$2s^2p^6$
16	S	2,03	10,360	23,33	34,83	47,30	72,68	88,049	280,93	328,23	379,10	447,09	
17	Cl	3,57	12,967	23,83	39,61	53,46	67,8	97,03	114,139	348,28	400,05	455,62	
18	Ar	—	15,759	27,629	40,74	59,81	75,02	91,007	124,319	143,456	422,44	478,68	
19	K	—	4,339	31,625	45,72	60,91	82,66	100,00	117,56	154,86	175,814	503,44	
20	Ca	—	6,112	11,868	50,908	67,00	84,41	108,78	127,7	147,24	188,54	211,270	
21	Sc	—	6,56	12,89	24,75	73,47	91,66	111,1	138,0	158,7	180,02	225,32	
22	Ti	—	6,83	13,63	28,2	43,24	99,22	119,36	140,8	168,5	193,2	215,91	
23	V	—	6,74	14,20	29,3	48,0	65,27	128,12	150,17	173,7	205,8	230,5	$3s^2p^6$
24	Cr	—	6,763	16,49	30,9	51,7	72,9	90,64	161,1	184,7	209,3	244,4	
25	Mn	—	7,43	15,64	33,69	53,7	77,6	100,1	191,19	196,46	221,8	243,3	

Таблица 19 (продолжение)

Z	Элемент	Номер потенциала ионизации											Оболочка
		0	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII	IX	X	
26	Fe	—	7,90	16,18	30,64	56,7	80,0	106,9	131,1	151,8	235,04	262,1	
27	Co	—	7,86	17,05	33,49	50,9	83,2	109	139,4	164	186,5	276	
28	Ni	—	7,63	18,15	35,16	55,1	73,1	113	142	175,1	202	224	
29	Cu	—	7,726	20,29	36,83	58,4	80,2	99	146	178	213	241	
30	n	1,35	9,394	17,964	39,70	61,0	85,2	108	129	182	217	256	
31	Ga	0,55	5,999	20,51	30,71	63,8	89,6	115	140	162	222	260	
32	Ge	1,0	7,899	15,934	34,22	45,71	91,3	120	149	175	197	265	
33	As	2,0	9,81	18,633	28,351	50,13	62,63	122	155	185	213	237	$3d^{10}$
34	Se	0,5	9,752	21,19	30,820	42,944	68,3	81,70	156	193	225	254	
35	Br	—	11,814	21,8	36	47,3	59,7	88,6	103,0	193	234	268	
36	Kr	3,38	13,999	24,359	36,95	52,5	64,7	78,5	111,0	126	234	277	
37	Rb	—	4,177	27,28	40,0	54,1	71,0	84,4	99,2	136	150	211	
38	Sr	—	5,695	11,030	43,6	57	73,4	90,8	106	122,3	162	177	
39	Y	—	6,38	12,24	20,52	61,8	77,0	94,7	115	129	146,2	191	
40	Zr	—	6,84	14,03	22,88	34,34	82,5	99	117,9	139	154,8	173,0	
41	Nb	—	6,88	14,32	24,7	38,3	50,55	105	123	143,0	166	182,2	
42	Mo	—	7,099	16,15	27,16	41,0	56,0	68	130	149	170,0	194	$4s^2p^6$
43	Tc	—	7,28	15,26	31,9	44,2	59,8	76,0	88,4	156	177	198,9	
44	Ru	—	7,37	16,76	28,47	50,3	63,6	80,7	98,1	110,7	184	206	
45	Rh	—	7,46	18,08	31,06	45,76	71,1	85,2	103,8	122,2	135	214	
46	Pd	—	8,34	19,43	32,93	49,85	65,5	94,2	109,0	128,9	148	155	
47	Ag	1,06	7,576	21,49	34,83	51,9	69,90	87,5	119,4	134,8	156	176	
48	Cd	1,90	8,993	16,908	37,48	54,6	73,4	92,8	111,5	146,6	162,6	185	
49	In	0,70	5,786	18,869	28,03	58,4	76,8	97,0	117,7	137,6	176	192	
50	Sn	0,80	7,344	14,632	30,6	40,734	81,3	101,3	122,8	144,7	166	207	$4d^{10}$

Таблица 19 (продолжение)

Z	Элемент	Номер потенциала ионизации											Оболочка
		0	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII	IX	X	
51	Sb	1,50	8,641	16,53	24,8	44,3	56	106,7	127,9	150,6	173	196	$4d^{10}$
52	Te	1,40	9,009	18,6	28,4	37,7	60,6	70,7	134,2	156,5	180	205	
53	J	2,51	10,451	19,131	29,6	41,5	51,7	76,0	89	163,6	187	212	
54	Xe	3,29	12,130	21,21	31,8	43,7	54,3	67,8	92	105	195	219	
55	Cs	—	3,894	25,1	34,0	45,6	57,7	69,8	84,2	111	125	228	
56	Ba	—	5,212	10,004	36,8	48,5	59,5	75,0	86,6	102	131	146	
57	La	—	5,577	11,06	19,17	51,5	64	76,9	92,7	104,7	122	152	
58	Ce	—	5,47	10,85	—	36,5	67,7	80,9	93,6	111,6	124	142	
59	Pr	—	5,42	10,55	—	—	—	85,5	99,4	112,7	131	144	
60	Nd	—	5,49	10,72	—	—	—	—	104,3	119,1	133	153	$5s^2p^6$
61	Pm	—	5,55	10,90	—	—	—	—	—	124,5	140	155	
62	Sm	—	5,63	11,07	—	—	—	—	—	—	146,0	162	
63	Eu	—	5,67	11,25	—	—	—	—	—	—	—	168	
64	Gd	—	6,14	12,1	—	—	—	—	—	—	—	—	
65	Tb	—	5,85	11,52	—	—	—	—	—	—	—	—	
66	Dy	—	5,93	11,67	—	—	—	—	—	—	—	—	
67	Ho	—	6,02	11,800	—	—	—	—	—	—	—	—	
68	Er	—	6,10	11,93	—	—	—	—	—	—	—	—	
69	Tm	—	6,18	12,05	23,71	—	—	—	—	—	—	—	
70	Yb	—	6,254	12,17	25,2	—	—	—	—	—	—	—	$4f^{14}$
71	Lu	—	5,426	13,9	—	—	—	—	—	—	—	—	
72	Hf	—	7,0	14,9	23,3	33,3	—	—	—	—	—	—	
73	Ta	—	7,89	—	—	—	—	—	—	—	—	—	
74	W	—	7,98	—	—	—	—	—	—	—	—	—	
75	Re	—	7,88	—	—	—	—	—	—	—	—	—	

Таблица 19 (окончание)

Z	Элемент	Номер потенциала ионизации											Оболочка
		0	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII	IX	X	
76	Os	—	8,7	—	—	—	—	—	—	—	—	—	
77	Ir	—	9,1	—	—	—	—	—	—	—	—	—	
78	Pt	—	9,0	18,563	—	—	—	—	—	—	—	—	
79	Au	2,39	9,225	20,5	—	—	—	—	—	—	—	—	
80	Hg	3,17	10,437	18,756	34,2	—	—	—	—	—	—	—	
81	Tl	—	6,108	20,428	29,83	50	—	—	—	—	—	—	
82	Pb	1,20	7,416	15,032	31,937	42,32	68,8	—	—	—	—	—	$5d^{10}$
83	Bi	2,0	7,289	16,69	25,56	45,3	56,0	88,3	—	—	—	—	
84	Po	0,6	8,42	17,9	27,5	36,5	51,1	—	—	—	—	—	
85	At	—	9,51	—	29,3	40,3	54,6	—	—	—	—	—	
86	Rn	—	10,748	20,0	—	41,4	—	—	—	—	—	—	
87	Fr	—	3,984	21,9	32,0	—	—	—	—	—	—	—	
88	Ra	—	5,279	10,147	33,9	45,3	—	—	—	—	—	—	
89	Ac	—	6,9	12,1	—	47,9	59,8	—	—	—	—	—	
90	Th	—	6,95	11,5	20,0	28,8	63,6	—	—	—	—	—	
91	Pa	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	
92	U	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	
93	Np	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	$6s^2p^6$
94	Pu	—	5,8	—	—	—	—	—	—	—	—	—	
95	Am	—	6,0	—	—	—	—	—	—	—	—	—	
96	Cm	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	$5f^{14}$

Таблица 20

Электронное сродство, *эв*

Z	Элемент	Расчетная экстраполяция		Опытные данные разных авторов
		по А. А. Савельеву	по Ю. В. Зефирову	
1	H	0,739	0,70—0,71	0,774—0,778
2	He	—0,622	—(0,42—0,42)	—
3	Li	0,439	0,44—0,48	0,2—0,8
4	Be	—0,490	—(0,77—0,73)	—
5	B	0,020	—(0,09—0,03)	—
6	C	0,99	1,00—1,07	0,98—1,75
7	N	—0,40	—(0,37—0,33)	—
8	O	1,125	0,92—1,01	0,9—1,48
9	F	3,25	3,01—3,12	3,37—3,62
10	Ne	—0,924	—(0,93—0,83)	—
11	Na	0,29	0,15—0,24	0,1—0,4
12	Mg	—0,62	—(0,76—0,67)	—
13	Al	0,52	—	—
14	Si	1,66	1,67—1,76	—
15	P	0,73	—	—
16	S	2,03	2,20—2,29	2,07—2,37
17	Cl	3,57	3,72—3,81	3,61—3,87

Таблица 21

Параметры изоэлектронных рядов, по А. А. Савельеву

N	b	$Be^{-\alpha}$	Δ	$\gamma_3 \cdot 10^{-4}$	$\gamma_4 \cdot 10^{-5}$	$\gamma_8 \cdot 10^{-10}$
1	0,000	0,00	0,00	—3,3	18,5	280
2	0,625	—0,07	0,84	—4,1	18,2	270
3	1,592	0,35	—1,175	0,0	6,5	10
4	2,144	0,45	—0,356	0,0	4,0	18
5	3,073	0,75	—1,906	0,0	8,0	—10
6	3,752	0,81	—1,441	0,0	5,7	0
7	4,423	0,77	—0,368	—0,2	0,1	0
8	5,256	1,65	—3,300	—0,2	0,3	0
9	5,945	1,43	—1,386	—0,1	0,5	0
10	6,604	1,84	0,248	—0,6	1,1	0
11	7,868	2,51	—5,324	—3	7	—
12	8,460	2,44	—4,66	—1	5	—

Таблица 21 (окончание)

N	b	$Bc^{-\alpha}$	Δ	$\gamma_3 \cdot 10^{-4}$	$\gamma_4 \cdot 10^{-5}$	$\gamma_8 \cdot 10^{-10}$
13	9,754	2,27	—4,60	0	6	—
14	10,265	2,87	—4,51	0	4	—
15	10,773	3,18	—4,00	—8	6	—
16	11,712	2,44	—3,54	0	4	—
17	12,358	2,14	—1,72	0	5	—
18	12,999	1,92	0,18	0	9	—
19	14,53	2,37	—4,88	0	—	—
20	15,20	2,37	—3,90	0	—	—
21	16,3	—	—	—	—	—
22	—	—	—	—	—	—
23	—	—	—	—	—	—
24	—	—	—	—	—	—
25	—	—	—	—	—	—
26	—	—	—	—	—	—
27	—	—	—	—	—	—
28	—	—	—	—	—	—
29	22,5	4,17	—6,8	0,7	0,7	—
30	23,0	4,07	—5,9	0,6	0,6	—
31	24,8	4,17	—8,2	0,6	0,6	—
32	25,3	4,07	—6,9	0,6	0,6	—
33	25,2	4,17	—6,1	0,6	0,6	—
34	26,5	4,17	—6,4	0,6	0,6	—
35	27,0	4,17	—5,1	0,6	0,6	—
36	27,5	4,17	—3,8	0,6	0,6	—
37	29,9	2,0	—6,5	—	—	—
38	30,5	2,0	—	—	—	—
39	—	—	—	—	—	—
40	—	—	—	—	—	—
41	—	—	—	—	—	—
42	—	—	—	—	—	—
43	—	—	—	—	—	—
44	—	—	—	—	—	—
45	—	—	—	—	—	—
46	—	—	—	—	—	—
47	37,6	4,09	—6,7	—	0,6	—
48	38,2	4,2	—5,9	—	0,6	—
49	39,9	4,2	—7,9	—	0,6	—
50	40,3	4,2	—7,0	—	0,6	—
51	40,6	4,2	—6,5	—	0,6	—
52	41,3	4,2	—6,2	—	0,6	—
53	41,8	4,2	—5,5	—	0,6	—
54	42,1	4,2	—4,5	—	0,6	—

Таблица 22

Орбитальные радиусы атомов и ионов, по И. Т. Уэберу, Д. Т. Кромеру и В. Ф. Братцеву

Период	1		2		3		4		5	
I	(H)									
II	Li	1,586	Be	1,08	B	0,84	C	0,65	N	0,51
	+1	0,186		(1,040)	+3	(0,776)		(0,620)		(0,521)
		(0,189)	+2	0,139		0,11	+4	0,09		(0,078)
									+5	0,076
III	Na	1,798	Mg	1,370	Al	1,428	Si	1,16	P	0,96
	+1	(1,713)	+2	(1,279)	+3	(1,312)	+4	(1,068)	+5	(0,916)
		(0,278)		0,25		0,23		0,21	+3	0,184
		0,29		(0,246)	−1	(0,221)	+2	(0,201)		0,803
						1,044		0,904		
IV	K	2,162	Ca	1,690	Sc	1,570	Ti	1,477	V	1,401
	+1	0,592	+2	0,538	+3	0,493	+3	0,464	+3	0,430
							+4	0,456	+5	0,424
	Cu	1,191	Zn	1,065	Ga	1,254	Ge	1,090	As	0,982
	+1	0,312	+2	0,293	+3	0,276	+4	0,260	+3	0,826
	+2	0,308								0,247
V	Rb	2,287	Sr	1,836	Y	1,693	Zr	1,593	Nb	1,589
	+1	0,734	+2	0,683	+3	0,640	+4	0,603	+3	0,703
										0,559
	Ag	1,286	Cd	1,184	In	1,382	Sn	1,240	Sb	1,140
	+1	0,536					+2	0,997	+3	0,931
			+2	0,507	+3	0,481	+4	0,458	+5	0,438
VI	Cs	2,518	Ba	2,060	La	1,915	Hf	1,476	Ta	1,413
	+1	0,921	+2	0,866			+4	0,610	+5	0,589
	Au	1,187	Hg	1,126	Tl	1,319	Pb	1,215	Bi	1,130
	+1	0,633	+1	1,099	+1	1,949	+2	0,986	+3	0,933
	+3	0,600	+2	0,605	+3	0,580	+4	0,558		
VII	Fr	2,447	Ra	2,042	Ac	1,895	Th	1,788	Pa	1,804
							+4	0,880		

					La	1,915	Ce	1,978	Pr	1,942
					+3	0,819	+3	0,800	+3	0,783
							+4	0,778	+4	0,763
	Eu	1,826			Gd	1,713	Tb	1,775	Dy	1,750
	+2	0,741			+3	0,710	+3	0,698	+3	0,686
	+3	0,723								

6		7		8						0	
		H	0,529							He	0,291
O	0,448	F	0,39							Ne	0,35
	(0,450)		(0,396)								(0,354)
−1	0,45	−1	0,369								
−2	0,46	−1	0,400								
−4	0,44	+5	0,39								
+6	0,07	+7	0,068								
S	0,85	Cl	0,75							Ar	0,69
	(0,810)		(0,725)								(0,659)
−1	0,81	−1	0,742								
−2	0,83	−1	0,666								
	0,73	+5	0,63								
+4	0,73	+7	0,15								
+6	0,18										
Cr	1,453	Mn	1,278	Fe	1,227	Co	1,181	Ni	1,139		
+2	0,414	+2	0,388	+2	0,364	+2	0,343	+2	0,325		
+2	0,401	+4	0,365	+3	0,355	+3	0,336	+3	0,319		
Se	0,918	Br	0,851							Kr	0,795
−1	0,92	−1	0,869								
−2	0,92	−1	1,734								
Mo	1,520	Tc	1,391	Ru	1,410	Rh	1,364	Pd	0,567		
+3	0,661			+3	0,598	+3	0,570	+2	0,553		
+6	0,542			+4	0,582	+4	0,500	+4	0,536		
Te	1,111	I	1,044							Xe	0,986
−1	1,11	−1	1,065								
−2	1,12	−1	0,881								
W	1,360	Re	1,310	Os	1,266	Ir	1,227	Pt	1,221		
+6	0,570	+2	0,73	+4	0,655	+4	0,649	+4	0,628		
Po	1,212	At	1,146							Rn	1,090
U	1,775	Np	1,741	Pu	1,784	Am	1,757	Cm	1,657	Bk	1,626
+4	0,843	+3	0,842	+3	0,825						
+6	0,811	+6	0,796	+4	0,810						

Nd	1,912	Pm	1,882	Sm	1,854
+3	0,767	+3	0,751	+3	0,737

Ho	1,727	Er	1,703	Tm	1,681	Yb	1,658	Lu	0,553
+3	0,674	+3	0,664	+3	0,652	+2	0,656	+3	0,632
						+3	0,642		

В табл. 21 приведены численные значения коэффициентов в формуле (7) для каждого изоэлектронного ряда. Вычисления проведены для 54 изоэлектронных рядов, за исключением части d-элементов, так как для них количество опытных данных и их точность были недостаточными.

Оказалось, что для всех изоэлектронных рядов величина $e^{-\alpha} = 0{,}57$ получилась одной и той же.

Выражение $Be^{-\alpha K} = Be^{-\alpha(Z-N-1)}$ уменьшается по мере роста заряда иона и, следовательно, уменьшения размеров электронной оболочки. Оно в какой-то степени характеризует уменьшение взаимного отталкивания электронов быстрее, чем обратно пропорционально квадрату расстояния.

Параметр Δ представляет собой постоянный для каждого изоэлектронного ряда член, не зависящий от Z. Он позволяет энергетически оценить переход от одной электронной оболочки к другой.

Три коэффициента — γ_3, γ_4 и γ_8 — характеризуют составляющие релятивистской поправки.

Орбитальные радиусы атомов и ионов

В последние годы была опубликована работа И. Т. Уэбера и Д. Т. Кромера [29], в которой они, используя уравнения Дирака, вычислили систему орбитальных радиусов. Кроме того, В. Ф. Братцевым выпущены таблицы атомных волновых функций [30], на основе которых были вычислены размеры орбитальных радиусов, соответствующих максимальной плотности электронных облаков вероятности. Эти таблицы получены при использовании метода самосогласованного поля Хартри—Фока. Все результаты относятся к сферически-симметричной составляющей волновой функции. Анализ этих новых систем орбитальных радиусов приведен в работах В. И. Лебедева [31, 32]. Сводные данные — в табл. 22.

Материалы В. Ф. Братцева положены в основу таблицы для второго и третьего периодов, а аналогичные цифры по Уэберу и Кромеру приведены в скобках. Остальные периоды записаны по данным этих авторов. Чтобы

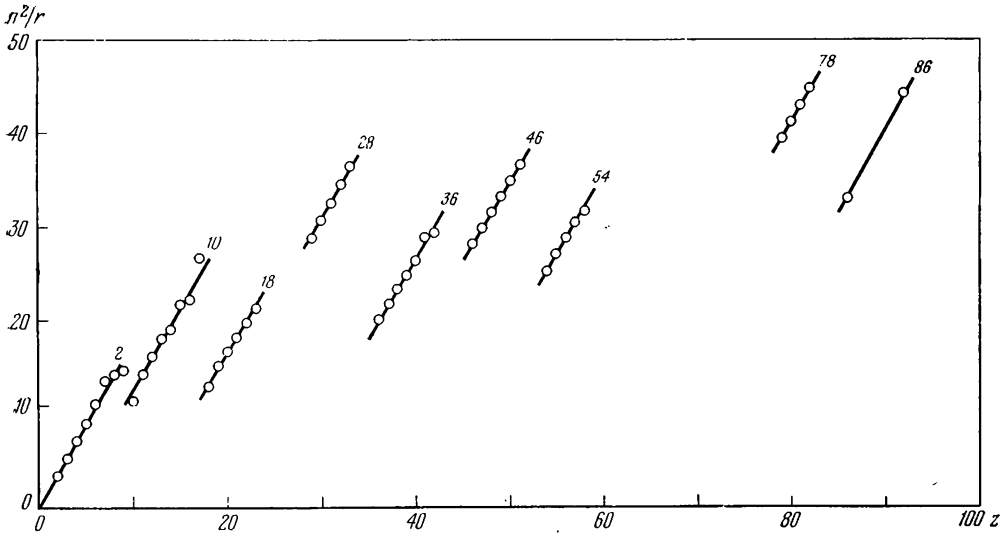


Рис. 15. Зависимость обратных орбитальных радиусов n^2/r от атомных номеров Z

Таблица 23

Зависимость n^2/r от атомных номеров

n	N	Значения Z и n^2/r							
1	2	2 3,44	3 5,38	4 7,19	5 9,09	6 11,11	7 13,16	8 14,29	9 14,71
2	10	10 11,43	11 14,39	12 16,26	13 18,10	14 19,00	15 21,74	16 22,22	17 26,17
3	18	18 13,04	19 15,20	20 16,73	21 18,25	22 19,74	23 21,23	24 —	25 —
3	28	29 28,85	30 30,72	31 32,61	32 34,62	33 36,44	34 —	35 —	36 —
4	36	36 20,13	37 21,80	38 23,43	39 25,00	40 26,53	41 29,10	42 29,52	43 —
4	46	46 28,22	47 29,85	48 31,56	49 33,26	50 34,93	51 36,53	52 —	53 —
5	54	54 25,35	55 27,14	56 28,87	57 30,53	58 31,73	59 —	60 —	61 —
5	78	79 39,49	80 41,32	81 43,10	82 44,80	83 —	84 —	85 —	86 —
6	86	86 33,03	87 —	88 —	89 —	90 —	91 —	92 44,39	93 —

* Верхний ряд — значения Z, нижний — n^2/r.

сделать их более наглядными, мы по ним вычислили обратные величины n^2/r для концов рядов и периодов таблицы Менделеева (табл. 23) и нанесли их на рис. 15.

Как видим, для каждого изоэлектронного ряда все точки ложатся практически на одну прямую. Некоторый разброс для малых значений орбитальных радиусов r можно объяснить тем, что для них округление последней цифры дает заметное отклонение обратной величины n^2/r.

Прямые для изоэлектронных рядов в первом приближении идут параллельно одна другой. Продолжив их до пересечения с осью абсцисс, можно получить величины экранирующих зарядов b, которые отличаются от экранирующих зарядов, определяемых по потенциалам ионизации, так как при ионизации электрон удаляется и происходит перестройка оболочки, а при расчете орбитальных радиусов все электроны в оболочке рассматриваются совместно.

Из изложенного вытекает, что в первом приближении для расчета орбитальных радиусов атомов и ионов можно пользоваться следующим выражением:

$$r \approx \frac{0{,}571n^2}{(Z - b_1)},$$

где 0,571 — усредненный размерный коэффициент, Å; b_1 — экранирующий заряд.

Литература

1. *L. Pauling.* The nature of the chemical bond. Ithaca, N. Y., Cornell Univ. Press, 1960.
2. *J. C. Slater.* Atomic shielding constants.— Phys. Rev., № 2, 1930, 36.
3. *М. М. Протодьяконов.* Свойства породообразующих минералов и их электронное строение. М., «Наука», 1965.
4. *P. G. Kruger, W. E. Shoupp.* Deepest terms in ions of the isoelectronic sequences Ni I to Kr IX and Pd I to Xe IX.— Phys. Rev., № 2, 1934, 46.
5. *E. Lisitzin.* Uber die Ionisierung spannungen der Elemente in verschiedenen Ionisierungszustanden.— Soc. scient. Fennica. Comment. phys.-math. Helsingfors, H. 4, 1938.
6. *Landolt-Börnstein.* Zahlenwerte und Funktionen auf Physik-Chemie-Astronomie-Geophysik-Technik. I Teil. Atome, Ionen, Berlin, Göttingen, Heidelberg, Springer Verlag, 1950.
7. *П. В. Немцев.* Об одной формуле для потенциалов ионизации атомных ионов.— Ж. физ. хим., 1955, т. 29, вып. 5.
8. *П. В. Немцев.* О некоторых формулах потенциалов ионизации атомных ионов.— Ж. физ. хим., 1955, т. 29, вып. 7.
9. *А. Г. Большаков, В. М. Червяков.* О некоторых соотношениях для расчета энергии отрыва электронов от атомов. Сообщение I. Одесса, изд. Одесск. политехн. ин-та, 1955.
10. *В. М. Червяков.* Исследование некоторых фундаментальных свойств атомов химических элементов. Одесса, изд. Одесск. политехн. ин-та, 1956.
11. *C. E. Moore.* Atomic energy levels.— J. Res. Nat. Bureau Standards, 1949; 1; 1952; 2; 1958. 3.
12. *W. Finkelnburg. W. Gumbach.* Naturwissenschaften, 1955, № 2, 42.
13. *W. Finkelnburg, W. Stern.* Phys. Rev., 1955, № 2, 77.
14. *W. Lotz.* J. Opt. Soc. America, 1967, № 7.
15. *W. Lotz.* Astrophys. J., 1967, v. XIV.
16. *А. А. Савельев.* Об исследовании энергетических характеристик атомно-ионных образований. М., изд. ИФЗ АН СССР, 1970.
17. *А. А. Савельев.* Расчет энергетических параметров, определяющих физико-химические свойства элементов в соединениях. М., изд. ИФЗ АН СССР, 1970.
18. *А. А. Савельев.* К вопросу исследования потенциалов ионизации с помощью изоэлектронных последовательностей. М., изд. ИФЗ АН СССР, 1970.
19. *М. А. Ельяшевич.* Атомная и молекулярная спектроскопия. М., Физматгиз, 1962.
20. *W. Braunbeck.* Die Mosely-Diagramme der Ionisierungsspannungen der leichten Atome und Ionen.— Z. Phys., 1930 № 63.
21. *В. М. Клечковский.* Распределение атомных электронов и правило последовательного заполнения $(n + l)$-групп. М., Атомиздат, 1968.
22. *И. Ленемюир.* Расположение электронов в атомах и молекулах. Л., «Академия», 1925.
23. *G. N. Lewis.* The atom and molecule.— J. Amer. Chem. Soc., 1916, № 4.
24. *М. М. Протодьяконов.* Свойства и электронное строение породообразующих минералов. М., «Наука», 1969.
25. *Ю. В. Зефиров.* Электронное сродство атомов легких элементов.— Ж. структ. хим., 1972, т. XIII, № 4.
26. *Ю. В. Зефиров.* Графический метод оценки устойчивости отрицательных ионов.— Сб. «Исследование физических свойств горных пород». М., изд. ИФЗ АН СССР, 1973.
27. *Ю. В. Зефиров.* О сопоставимости результатов экспериментального и экстраполяционного определения сродства атомов к электрону.— Ж. структ. хим., 1973, т. XIV, № 4.
28. *Ю. В. Зефиров. М. М. Протодьяконов.* О некоторых формулах для экстраполяции атомных потенциалов ионизации.— Ж. оптика и спектроск., 1973, т. XXXIV, № 4.
29. *J. T. Waber, D. T. Cromer.* Orbital radii of atoms and ions.— J. Chem. Phys., 1965, v. 42, № 12.
30. В. *Ф. Братцев.* Таблицы атомных волновых функций. М.— Л., «Наука», 1966.
31. *В. И. Лебедев.* Орбитальные размеры атомов — новая система радиусов и закономерности, определяющие межатомные расстояния и изоморфизм. Вестник ЛГУ, 1967, 6.
32. *В. И. Лебедев.* Ионно-атомные радиусы и их значение для геохимии и химии. Изд-во ЛГУ, 1969.

РЕЗЮМЕ

Обобщая материалы второго раздела книги, необходимо заметить следующее.

1. Существуют периодические изменения свойств атомных ядер и атомов. Эти две периодичности не совпадают. Однако между ними существуют некоторые корреляционные связи (см. гл. 1, рис. 4).
2. Все ядра состоят из протонов и нейтронов. Протон является элементарной частицей, а нейтрон — составной. Нейтрон можно рассматривать как систему: протон — метастабильная отрицательная частица — метон. Элементарные частицы обладают резкой анизотропией фундаментального поля и прецессией (см. раздел I). Напряженность поля во втором подпространстве достигает максимума на поверхности конуса прецессии (конуса анизотропии) и минимума — в экваториальной плоскости и на оси прецессии (см. гл. 2, табл. 11, рис. 4).

   В устойчивых состояниях одноименно-заряженные частицы стремятся расположиться в местах минимума напряженности полей, т. е. в одной плоскости или соосно. Разноименно-заряженные стремятся на поверхность конусов прецессии (см. гл. 2, рис. 5). Максимумы напряженности полей возникают в местах пересечения одноименных конусов анизотропии. Это приводит к симметричным упаковкам протонов и метонов в ядрах (см. гл. 2, рис. 6—9).

   Для изобар протонная конфигурация остается постоянной, а меняется взаимное положение метонов. Для изотонов — метонная конфигурация не меняется, а варьирует протонная фигура. Для изотопов одновременно меняются протонная и метонная упаковки. Наиболее устойчивы ядра при соответствии протонных конфигураций метонным. Возможно несколько таких комбинаций (изомеров).

   Спиновые и магнитные моменты ядер определяются суммой моментов протонов и метонов с учетом их взаимной ориентации. При тетраэдрической и октаэдрической симметрии эта сумма равна нулю.

   Силы, действующие на каждую частицу в ядре из-за прецессии и орбитального движения при резкой анизотропии поля, все время меняются, что вызывает большие радиальные колебания элементарных частиц и придает всей картине статистический характер.

   Средняя плотность вещества ядра по радиусу остается постоянной, а к периферии — падает (см. гл. 2, рис. 9).
3. Для внутренних, ближайших к ядру частей электронных оболочек атомов характерна водородоподобная схема. Для внешних — типична схема чередования $(n + l)$-групп по В. М. Клечковскому. В средней по радиусу части существует зона пересечения электронных оболочек (см. гл. 3, рис. 5 и 6). Не только внутренние электроны экранируют внешние электроны от ядра, но и внешние оказывают экранирующее действие на внутренние.
4. Потенциалы ионизации атомов и ионов целесообразно изучать по изоэлектронным рядам (см. гл. 4). В первом приближении каждый такой ряд потенциалов ионизации может быть описан параболической интерполяционной формулой (5) с тремя параметрами. Общая картина изоэлектронных рядов хорошо прослеживается на диаграммах (см. рис. 5, 7 и 12).

Величины экранирующих зарядов составляют значительную долю (от 31 до 92%) от заряда ядра Z. Поэтому пользование нулевым приближением, т. е. пренебрежение взаимодействием электронов между собой является недопустимым. Гипотеза о сферической симметрии электронных оболочек не позволяет правильно определять экранирующие заряды и поэтому неприемлема.

Представление о том, что электроны, двигаясь вокруг ядра, периодически образуют симметричные фигуры, позволяет объяснить, почему эффективный экранирующий заряд получается меньше арифметической суммы зарядов экранирующих электронов (см. табл. 17, рис. 13).

Электрическое поле даже вокруг нейтрального атома является анизотропным.

III. СТРОЕНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ ОБОЛОЧЕК АТОМОВ

Литература по строению электронных оболочек атомов весьма обширна (например, [1—18]). Краткий обзор состояния вопроса в этой области приведен в нашей монографии 1969 г., поэтому в данном издании мы его опускаем и ограничиваемся только некоторыми дополнительными замечаниями.

Обычно, решая уравнение Шредингера для атома, дают радиальное и угловое распределение электронной плотности водородоподобных атомов по отдельности. Лишь в небольшом числе работ приводится произведение радиальной и угловой составляющих волновых функций [16—17]. Но даже и в них не рассматривается произведение этих функций на дифференциал объема, за исключением случая для *s*-электронов. Основанием для этого служит гипотеза о коллективности электронов, составляющих атом, и невозможности их индивидуализации, полной или частичной.

Известно, что решениями уравнения Шредингера могут служить линейные комбинации волновых функций, которые дают уравнения гибридизированных электронных оболочек. Обычно разбираются простейшие случаи гибридизации типа sp, sp^2 и sp^3.

В работах М. А. Ельяшевича [15], Д. П. Григорьева [18] и других исследователей приведены также иные разновидности гибридизации, которые сведены в табл. 24. Но не все указанные в ней случаи могут оказаться возможными на практике. В самом деле, если сопоставить их с рис. 14(см. стр. 193), то нетрудно заметить, что для атомов второго и третьего периодов таблицы Менделеева *s*- и *p*-электроны находятся в одной и той же электронной оболочке и потому могут давать гибридизацию. Несколько сложнее обстоит дело с *ds*-гибридизацией, так как 3*d*-электроны соответствуют значению главного квантового числа $n = 3$, а для 4*s*-электронов — $n = 4$.

Таблица 24

Гибридизация электронных оболочек

Число «сгустков»	Комбинируемые состояния	Расположение «сгустков«
2	$sp - dp$	Линейное, или «гантель»
	$p^2 - ds - d^2$	Уголковое
3	$sp^2 - dp^2 - ds^2 - d^3$	Треугольное плоское
	$p^3 - d^2p$	Треугольное пирамидальное
4	$d^2p^2 - dsp^2$	Квадратное
	d^4	Тетрагональное пирамидальное
	$sp^3 - d^3s$	Тетраэдрическое
5	d^2sp^2	Пятиугольное пирамидальное
6	d^2sp^3	Октаэдрическое
	$d^4sp - d^5p$	Шестиугольное призматическое

Еще сложнее обстоит дело с dp-гибридизацией, например с комбинациями типа dp, dp^2, d^2p, d^2p^2, d^5p. В этом случае не только d- и p-электроны находятся в разных квантовых состояниях, но между ними должна находиться еще и оболочка из $4s^2$-электронов. Остается непонятным, почему же она не дает гибридизации, а дальше отстоящая $4p$-оболочка — дает.

Не видно физических причин для образования гибридизированных оболочек типа dsp^2, d^2sp^2, d^2sp^3 и d^4sp. В них участвует только один из двух $4s^2$-электронов, но зато участвуют дальше отстоящие $4p$-электроны. Кроме того, подобные комбинации электронов могут появиться только для элементов с атомными номерами $Z > 1$, а для них разница в энергиях и радиусах $3d$- и $4sp$-оболочек будет слишком велика. Поэтому возможность осуществления всех указанных в табл. 1 вариантов гибридизации вызывает сомнения.

Таким образом, не все вопросы строения электронных оболочек решены до конца и потому нуждаются в дальнейшем исследовании.

Мы проведем в этой главе рассмотрение данного вопроса, в необходимых случаях опираясь на ТФП.

Глава 1

ФОРМЫ ГИБРИДИЗИРОВАННЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ ОБОЛОЧЕК

Рациональная система координат

Как известно, уравнение Шредингера решено для одноэлектронного атома водорода и для водородоподобных ионов. Для многоэлектронных атомов, т. е. для подавляющего большинства элементов таблицы Менделеева, точного решения нет.

Существует мнение, что в нулевом приближении все многоэлектронные атомы можно считать водородоподобными, но каждому электрону следует приписывать разные наборы четырех квантовых чисел: n, l, m и s. При этом широко используются гибридизированные волновые функции [19—24]. Все вопросы в этой области считаются давно решенными. Однако при детальном анализе современного состояния теории гибридизированных электронных оболочек выявляется, что некоторые вопросы решены не до конца, а иногда и не корректно. Поэтому приведем анализ современного состояния данного вопроса и рассмотрим некоторые новые возможности. Сделаем это на примере весьма распространенной sp^3-гибридизированной электронной оболочки для главного квантового числа $n = 2$.

Как известно, волновая функция обычно дается в виде произведения радиальной и угловой составляющих.

Для $2s$-состояния ($l = 0$) волновая функция (амплитуда вероятности) записывается так [15]:

$$\psi_s = \frac{\left(1 - \frac{\sigma}{2}\right)}{\sqrt{2}\, e^{\sigma/2}} \frac{1}{\sqrt{4\pi}}. \qquad (1)$$

Для $2p$-состояния ($l = 1$) волновая функция имеет вид

$$\psi_{p_z} = \frac{\sigma}{2\sqrt{6}\,e^{\sigma/2}}\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta,$$

$$\psi_{p_x} = \frac{\sigma}{2\sqrt{6}\,e^{\sigma/2}}\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{+i\varphi}, \qquad (2)$$

$$\psi_{p_y} = \frac{\sigma}{2\sqrt{6}\,e^{\sigma/2}}\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{-i\varphi},$$

где σ — относительный радиус, выраженный в единицах радиуса первой боровской орбиты атома водорода $a = 0{,}529$ Å; θ — полярный угол (в сферической системе координат) в радианах; φ — меридиональный угол в той же системе координат.

Для зарядов ядра Z, отличных от единицы, рекомендуется формулы умножать на $(Z/a)^{3/2}$, а радиусы пересчитывать по формуле

$$\sigma = \frac{Zr}{a_0}.$$

Как видно, формулы (2) для p_x и p_y имеют комплексную угловую составляющую, где $e^{i\varphi} = \cos\varphi + i\sin\varphi$; $e^{-i\varphi} = \cos\varphi - i\sin\varphi$.

Взяв линейные комбинации из этих формул

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(e^{+i\varphi} + e^{-i\varphi}) \text{ и } -\frac{i}{\sqrt{2}}(e^{+i\varphi} - e^{-i\varphi}),$$

можно получить все три выражения для $2p$-состояний в действительной форме

$$\psi_{p_z} = \frac{\sigma}{2\sqrt{6}\,e^{\sigma/2}}\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta,$$

$$\psi_{p_x} = \frac{\sigma}{2\sqrt{6}\,e^{\sigma/2}}\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\sin\theta\cos\varphi, \qquad (3)$$

$$\psi_{p_y} = \frac{\sigma}{2\sqrt{6}\,e^{\sigma/2}}\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\sin\theta\sin\varphi.$$

Если возвести волновую функцию или амплитуду вероятности ψ в квадрат (или же взять произведение комплексно-сопряженных функций $\psi\psi$ *), то получится плотность вероятности, т. е. вероятность появления электрона в единице объема возле ядра в окрестностях точки с координатами σ, θ и φ.

Вероятность появления электрона в элементарном объеме dv равняется $|\psi|^2 dv$.

Производя интегрирование этой вероятности (на примере ψ_{p_z}) для радиусов в пределах $0 \leqslant \sigma < \infty$ и углов — полярного $0 \leqslant \theta < \pi$ и меридионального $0 \leqslant \varphi < 2\pi$, можно найти, что суммарная вероятность получается равной единице, т. е. электрон с достоверностью где-нибудь в пространстве да находится. Исходя именно из этого условия нормировки, определены численные коэффициенты в приведенных формулах.

В литературе встречаются чаще всего следующие способы изображения радиальной составляющей волновых функций.

На рис. 1, *а* показаны графики изменения амплитуды вероятности ψ, плотности вероятности $|\psi|^2$ и вероятности $|\psi|^2 dv$ в функции относительного радиуса σ. Для 2*s*-состояний амплитуда вероятности имеет как положительную, так и отрицательную часть, но плотность вероятности $|\psi|^2$ и сама вероятность $|\psi|^2 dv$ получаются положительными. Последняя кривая имеет два максимума и один узел (нулевое значение) между ними. Для 2*p*-составляющей радиальных узлов нет. Эти кривые имеют силу для любого направления в атоме, т. е. они являются сферически-симметричными.

Другой способ изображения (рис. 1, *б*) базируется на построении изолиний. Мы привели их для значений равной вероятности $|\psi|^2 dv$. Часто строят изолинии для плотности вероятности $|\psi|^2$.

Иногда еще более схематизируют изображение и проводят только одну граничную изолинию, внутри которой размещается бо́льшая часть (90 или 99%) всего электронного «облака».

Для угловой составляющей (по углу θ) обычно приводятся кривые для амплитуды вероятности ψ (рис. 2) или плотности вероятности $|\psi|^2$.

Кривые для угловой составляющей (по углу φ), а также для угловой составляющей вероятности $|\psi|^2 dv$ в литературе отсутствуют. В ряде случаев угловые составляющие волновых функций изображаются в аксонометрических проекциях в виде гантелеобразных фигур, что указывает на осевую симметрию каждой из $2p_x$-, $2p_y$- и $2p_z$-составляющих.

Для гибридизированных атомных орбиталей приводятся следующие нормированные формулы:

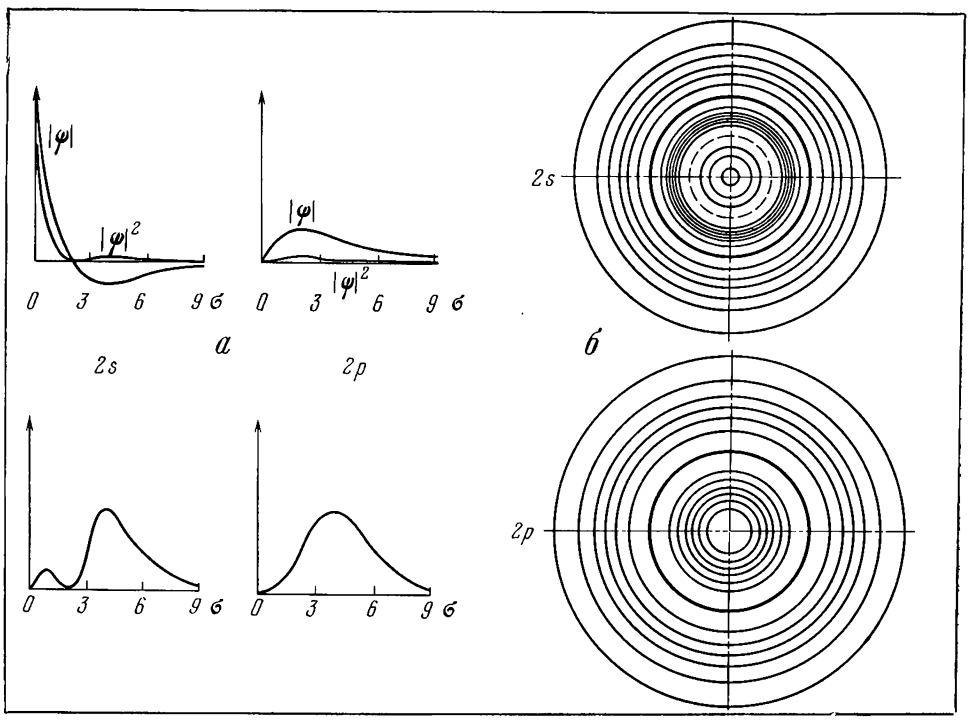


Рис. 1. Графики радиальной составляющей волновой функции

для sp-гибридизации

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_s + \psi_{p_x}),$$
$$\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_s - \psi_{p_x}); \tag{4}$$

для sp^2-гибридизации

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{3}}(\psi_s + \sqrt{2}\psi_{p_x}),$$
$$\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\psi_s - \frac{\sqrt{2}}{2}\psi_{p_x} + \frac{\sqrt{6}}{2}\psi_{p_y}\right), \tag{5}$$
$$\psi_3 = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\psi_s - \frac{\sqrt{2}}{2}\psi_{p_x} - \frac{\sqrt{6}}{2}\psi_{p_y}\right);$$

для sp^3-гибридизации

$$\psi_1 = \frac{1}{2}(\psi_s + \psi_{p_x} + \psi_{p_y} + \psi_{p_z}),$$
$$\psi_2 = \frac{1}{2}(\psi_s + \psi_{p_x} - \psi_{p_y} - \psi_{p_z}),$$
$$\psi_3 = \frac{1}{2}(\psi_s - \psi_{p_x} + \psi_{p_y} - \psi_{p_z}), \tag{6}$$
$$\psi_4 = \frac{1}{2}(\psi_s - \psi_{p_x} - \psi_{p_y} + \psi_{p_z}).$$

Одновременно даются графики этих функций (рис. 3). Иногда они приводятся в аксонометрических проекциях. Форма электронных облаков для sp-гибридизации получается линейная, для sp^2-гибридизации — в виде плоской треугольной звезды и для sp^3-гибридизации — в виде тетраэдра из гантелеобразных фигур. В последние годы подобные формы электронных облаков стали использоваться рядом ученых для построения форм молекул, а в некоторых простейших случаях — для кристаллов [25, 26]. Анализируя состояние современных представлений о водородоподобных электронных оболочках многоэлектронных атомов, необходимо сделать следующие замечания.

1. В общепринятой в атомной физике системе сферических координат оси $0X$, $0Y$ и $0Z$ получились неравноправными. Угол θ отсчитывается от полярной оси $0Z$ в любую сторону, а угол φ — от плоскости $X0Z$ и является двугранным. По-видимому, на выбор данной системы координат повлияла система, принятая в картографии для земного шара. В результате несмотря на то, что симметрия электронных облаков для p_x-, p_y- и p_z-состояний, как видно на рис. 2, относительно осей $0X$, $0Y$ и $0Z$ одинаковая, формулы для них (2) и (3) получаются разными. Желательно принять симметричную систему координат и симметричные формулы.

2. При изображении радиальной составляющей волновой функции ψ производится интегрирование по двум другим составляющим, т. е. по углам θ и φ (плотность вероятности умножается на $4\pi\sigma^2$, т. е. на поверхность шара радиуса σ). Между тем при изображении угловой составляющей такое интегрирование обычно не делается (для угла θ), а о составляющей по углам φ чаще всего даже не упоминается. Это приводит к тому, что три составляющие

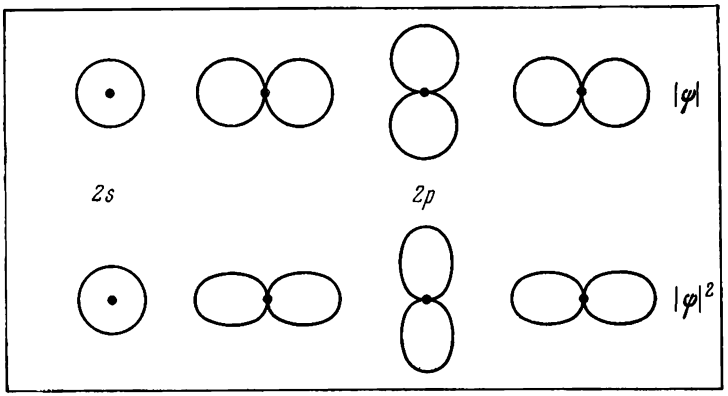


Рис. 2. Графики угловой составляющей волновой функции

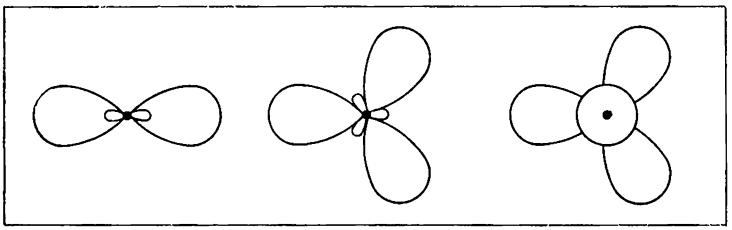


Рис. 3. Графики угловой составляющей для гибридизированных волновых функций

волновой функции: радиальная и две угловых — получаются неравноправными. В результате из внимания выпадает наличие таких углов θ, при которых вероятность для электронов достигает максимума. Как будет показано, этот максимум не лежит на осях $0X$, $0Y$ и $0Z$, что обычно считается само собой разумеющимся.

3. Для полного представления о форме электронных облаков вероятности необходимо пользоваться произведением всех трех составляющих волновой функции. Фактически же создалось такое положение, когда о форме электронных облаков стали судить только по одной угловой составляющей. Между тем форма электронных облаков для произведения составляющих существенно отличается от формы облаков только для угловой составляющей.

4. Форму кривой для угловой составляющей, которая показывает, как меняется плотность вероятности по углам, зачастую воспринимают как форму граничной поверхности, в которой размещается подавляющая часть электронного облака, что просто ошибочно.

5. Ввиду отличия фактической формы электронных облаков от обычно приводимых в литературе перекрывание оболочек смежных атомов в молекулах и кристаллах также существенно иное.

Рассмотрим вопрос о целесообразности симметричной системы координат несколько подробнее.

В обычной сферической системе координат полярный угол θ относительно оси $0Z$ задает в пространстве поверхность конуса с вершиной в начале координат и углом между его образующими 2θ.

Меридиональный угол φ задает плоскость, проходящую через ось $0Z$ и данный меридиан. Радиус σ определяет собой радиус сферы, описанной вокруг начала координат.

Пересечение конуса и плоскости дает две прямые, образующие конуса, пересекающиеся в начале координат. Пересечение этих прямых со сферой определяет четыре симметричные точки, находящиеся в разных квадрантах и отличающиеся одна от другой сочетанием знаков декартовых координат.

Уравнения преобразования сферических координат в декартовы и обратно следующие:

$$x = \sigma \sin\theta \cos\varphi;\ y = \sin\theta \sin\varphi;\ z = \sigma\cos\theta;$$

$$\sigma = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2};\qquad \cos\theta = \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}};\qquad \operatorname{tg}\varphi = \frac{y}{x}. \tag{7}$$

Чтобы сделать оси $0X$, $0Y$ и $0Z$ равноправными, следует принять новую систему угловых координат, в которой положение радиуса-вектора в любой точке одного из квадрантов задается величинами направляющих косинусов между этим направлением и осями $0X$, $0Y$ и $0Z$: $\cos\alpha$, $\cos\beta$ и $\cos\gamma$. Каждый такой косинус задает поверхность конуса вокруг одной из осей с углом при вершине 2α, 2β и 2γ. Конусы пересекаются один с другим по образующим, проходящим через начало координат. Эти образующие, пересекаясь со сферой, дают на ее поверхности восемь симметричных точек, различающихся только сочетанием знаков координат.

Формулы преобразования предлагаемых угловых координат в декартовы и обратно будут следующими:

$$x = \sigma\cos\alpha;\ y = \sigma\cos\beta;\ z = \sigma\cos\gamma;$$

$$\sigma = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2};\qquad \cos\alpha = \frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}};\quad \cos\beta = \frac{y}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}};$$

$$\cos\gamma = \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}. \tag{8}$$

Формулы преобразования угловых координат в обычные сферические и обратно таковы:

$$\cos\alpha = \sin\theta\cos\varphi;\ \cos\beta = \sin\theta\sin\varphi;\ \cos\gamma = \cos\theta;$$

$$\sigma = \sigma;\ \cos\theta = \cos\gamma;\ \sin\theta = \sqrt{\cos^2\alpha + \cos^2\beta};\ \operatorname{tg}\varphi = \frac{\cos\beta}{\cos\alpha}. \tag{9}$$

Для определения координат любой точки достаточно любых двух конусов и сферы. Третий конус служит для облегчения перехода от одной из осей $0X$, $0Y$ и $0Z$ к другой.

Как известно из аналитической геометрии, любые три направляющих косинуса связаны между собой соотношением

$$\cos^2\alpha + \cos^2\beta + \cos^2\gamma = 1. \tag{10}$$

При использовании предлагаемой системы угловых координат формулы (2) и (3) волновых функций для $2p$-электронов примут следующий вид:

$$\psi_{p_x} = \frac{\sigma}{2\sqrt{6}\,e^{\sigma/2}}\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\alpha,$$

$$\psi_{p_y} = \frac{\sigma}{2\sqrt{6}\,e^{\sigma/2}}\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\beta, \tag{11}$$

$$\psi_{p_z} = \frac{\sigma}{2\sqrt{6}\,e^{\sigma/2}}\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\gamma.$$

Таким образом, мы получили, что все три волновые функции имеют один и тот же математический вид относительно своих осей симметрии $0X$, $0Y$ и $0Z$. В этом состоит преимущество предлагаемой системы координат перед обычной сферической, что существенно облегчит нам дальнейшие исследования особенностей волновых функций для гибридизированных электронных облаков.

sp^3-электронная оболочка

Сумма амплитуд вероятности для трех $2p$-состояний равна

$$\psi_{p_x} + \psi_{p_y} + \psi_{p_z} = \frac{\sigma}{2\sqrt{6}\,e^{\sigma/2}}\sqrt{\frac{3}{4\pi}}(\cos\alpha + \cos\beta + \cos\gamma). \qquad (12)$$

Для тройной оси симметрии принятой системы координат все три направляющих косинуса равны один другому ($\cos\alpha_1 = \cos\beta_1 = \cos\gamma_1$). Подставляя их в (10), получим $\cos\alpha_1 = 1/\sqrt{3}$.

Возьмем теперь в первом квадранте произвольное направление, заданное направляющими косинусами $\cos\alpha$, $\cos\beta$ и $\cos\gamma$. Как известно из аналитической геометрии, косинус угла δ между этим направлением и тройной осью симметрии L^3 равняется

$$\cos\delta = \cos\alpha\cos\alpha_1 + \cos\beta\cos\beta_1 + \cos\gamma\cos\gamma_1 = \frac{1}{\sqrt{3}}(\cos\alpha + \cos\beta + \cos\gamma),$$

отсюда

$$\cos\alpha + \cos\beta + \cos\gamma = \sqrt{3}\cos\delta. \qquad (13)$$

Таким образом, при $\cos\delta = \text{const}$, т. е. на поверхности конуса, описанного вокруг тройной оси симметрии L^3 с углом между образующими 2δ, сумма трех направляющих косинусов остается постоянной. А это значит, что, согласно формуле (12), на поверхности этого конуса остается постоянной сумма амплитуд вероятности $\psi_{p_x} + \psi_{p_y} + \psi_{p_z}$. Следовательно, суммарная волновая функция для 2_{p_x}-, 2_{p_y}- и 2_{p_z}-состояний обладает осевой симметрией относительно тройной оси L^3.

Из формул (12) и (13) найдем

$$\psi_{p_x} + \psi_{p_y} + \psi_{p_z} = \frac{\sigma\sqrt{3}}{4\sqrt{2}\,e^{\sigma/2}\sqrt{\pi}}\cos\delta. \qquad (14)$$

Подставляя это выражение в уравнения (6) для $2sp^3$-гибридизации, получим, что все четыре формулы могут быть сведены в одну

$$\psi_1 = \psi_2 = \psi_3 = \psi_4 = \frac{1}{2}\left(\psi_s + \frac{\sigma\sqrt{3}}{4\sqrt{2}\,e^{\sigma/2}\sqrt{\pi}}\cos\delta\right), \qquad (15)$$

но в соответствии со знаками волновых функций для $2p$-состояний каждая из одинаковых гибридизированных $2sp^3$-орбиталей будет направлена по одной из четырех тройных осей декартовой системы координат под тетраэдрическими углами (109°28′) одна к другим.

Подставляя в формулу (15) выражение для волновой функции ψ_s (1), найдем амплитуду вероятности гибридизированной $2sp^3$-орбитали относительно тройной оси симметрии L^3. Возводя результат в квадрат, получим

формулу для плотности вероятности гибридизированной орбитали

$$|\psi_1|^2 = \frac{1}{128\pi e^{\sigma}}[2-\sigma+\sqrt{3}\,\sigma\cos\delta]^2. \tag{16}$$

Поскольку волновая функция для $2s$-состояния обладает шаровой симметрией, а для $2p^3$-состояний — осевой, общая симметрия одной гибридизированной $2sp^3$-орбитали может быть только осевой относительно тройной оси L^3. Для упрощения формул следует дальнейшие расчеты вести снова в обычной сферической системе координат, но иначе ориентировать ее в пространстве. Вместо оси $0Z$ возьмем ось L^3, полярный угол θ заменим полярным углом δ, а взамен меридионального φ используем меридиональный угол поворота Φ вокруг оси L^3, отсчитываемый от плоскости $Z0L^3$.

Чтобы определить вероятность $|\psi|^2\,dv$, необходимо найти выражение для элементарного объема dv в функции принятых координат σ, δ, Φ.

Элементарный объем будет равен произведению трех взаимно перпендикулярных сомножителей

$$dv = (d\sigma)(\sigma d\delta)(\sigma\sin\delta\, d\Phi).$$

Разделив переменные, найдем

$$dv = (\sigma^2\, d\sigma)(\sin\delta d\delta)(d\Phi). \tag{17}$$

Вероятность нахождения электрона в элементарном объеме dv равна

$$|\psi|^2 dv = \frac{[(2-\sigma)+\sqrt{3}\,\sigma\cos\delta]^2\sigma^2 d\sigma\sin\delta\, d\delta\, d\Phi}{128\pi e^{\sigma}}. \tag{18}$$

После подстановок и преобразований найдем

$$|\psi|^2 dv = \frac{\sigma^2(2-\sigma)^2\sin\delta}{128\pi e^{\sigma}} d\sigma\, d\delta\, d\Phi + \frac{2\sigma^3(2-\sigma)\sqrt{3}\cos\delta\sin\delta}{128\pi e^{\sigma}} d\sigma\, d\delta\, d\Phi + \\ + \frac{3\sigma^4\cos^2\delta\sin\delta}{128\pi e^{\sigma}} d\sigma\, d\delta\, d\Phi. \tag{18'}$$

Как видим, представить общую вероятность для $2sp^2$-гибридизированной волновой функции в виде привычного произведения трех функций от независимых переменных не удается. Можно записать такую вероятность в виде трех слагаемых, каждое из которых в отдельности может быть представлено как произведение трех независимых переменных.

Это выражение требуется проинтегрировать по всем трем переменным

$$\int_0^v |\psi|^2\, dv = \int_0^{\infty}\frac{\sigma^2(2-\sigma)^2 d\sigma}{128\pi e^{\sigma}}\int_0^{\pi}\sin\delta\, d\delta\int_0^{2\pi} d\Phi + \\ + \int_0^{\infty}\frac{2\sqrt{3}\sigma^3(2-\sigma)\,d\sigma}{128\pi e^{\sigma}}\int_0^{\pi}\cos\delta\sin\delta\, d\delta\int_0^{2\pi} d\Phi + \\ + \int_0^{\infty}\frac{3\sigma^4 d\sigma}{128\pi e^{\sigma}} + \int_0^{\pi}\cos^2\delta\sin\delta\, d\delta\int_0^{2\pi} d\Phi. \tag{19}$$

Проще всего сначала проинтегрировать по углам Φ

$$\int_0^{2\pi} d\Phi = 2\pi.$$

Следовательно,

$$\int_v |\psi|^2 dv = \int_0^\infty \frac{\sigma^2 (2-\sigma)^2 d\sigma}{64 e^\sigma} \int_0^\pi \sin\delta\, d\delta + \int_0^\infty \frac{2\sqrt{3}\,\sigma^3 (2-\sigma)\, d\sigma}{64 e^\sigma} \int_0^\pi \cos\delta \sin\delta\, d\delta +$$

$$+ \int_0^\infty \frac{3\sigma^4 d\sigma}{64 e^\sigma} \int_0^\pi \cos^2\delta \sin\delta\, d\delta. \qquad (20)$$

Если теперь зафиксировать значение угла δ и произвести интегрирование для всех значений радиуса σ, то получится, что вероятность пребывания электрона на поверхности конуса с углом 2δ при вершине будет равна

$$\left[\int_0^\infty \frac{\sigma^2 (2-\sigma)^2 d\sigma}{e^\sigma} + \int_0^\infty \frac{2\sqrt{3}\,\sigma^3 (2-\sigma)}{e^\sigma} \cos\delta\, d\sigma + \int_0^\infty \frac{3\sigma^4 d\sigma}{e^\sigma} \cos^2\delta\right] \frac{\sin\delta\, d\delta}{64}.$$

Как известно, интегралы подобного типа решаются при помощи факториальных Г-функций:

$$\int_0^\infty \frac{\sigma^n d\sigma}{e^\sigma} = n!$$

Отсюда

$$\int_v |\psi|^2 dv = \int_0^\pi \frac{1 - 3\sqrt{3}\cos\delta + 9\cos^2\delta}{8} \sin\delta\, d\delta. \qquad (21)$$

Если после интегрирования по Ф и σ провести его и по переменной δ, то получим вероятность, равную единице.

Если теперь зафиксировать в уравнении (20) значение радиуса σ и произвести интегрирование по полярному углу δ, то получим вероятность пребывания электрона на сфере радиусом σ и толщиной $d\sigma$, равную

$$\int_v |\psi|^2 dv = \frac{1}{32} \int_0^\infty \frac{\sigma^2 [(2-\sigma)^2 + \sigma^2]\, d\sigma}{e^\sigma}. \qquad (22)$$

Наконец, произведя интегрирование выражения (20) по радиусам в пределах $0 \leqslant \sigma \leqslant \infty$ и по полярным углам в пределах $0 \leqslant \delta \leqslant \pi$, получим вероятность пребывания электрона возле плоскости, проходящей через ось L^3 в пределах телесного угла $d\Phi$, равную

$$\int_v |\psi|^2 dv = \int_0^{2\pi} \frac{d\Phi}{2\pi}. \qquad (23)$$

Таким образом, каждая из этих формул справедлива только для одной переменной при интегральном учете двух других. Каждому значению радиуса σ соответствует своя зависимость вероятности от угла δ. Для разных радиусов максимум вероятности будет иметь место при различных значениях угла δ. Точно так же при каждом значении угла δ имеется своя зависимость вероятности от радиуса σ и свой максимум этой вероятности. Поэтому выражения (21) и (22) надо исследовать по отдельности. Выражение (23) указывает на осевую симметрию относительно L^3.

Проанализируем выражение (18) для вероятности появления электрона в объеме dv. Оно обращается в нуль при следующих условиях:

Условие	Геометрическое место
$2-\sigma+\sqrt{3}\,\sigma\cos\delta=0$	Узловая линия
$\sigma=0$	Начало координат
$\sigma=\infty$	В бесконечности
$\sin\delta=0$	На оси L^3

Из первого найдем

$$\sigma=\frac{2}{1-\sqrt{3}\cos\delta}. \tag{24}$$

Очевидно, что при $\cos\delta=1/\sqrt{3}$ знаменатель этой формулы обращается в нуль, а соответствующий радиус — в бесконечность. Следовательно, при таком значении $\cos\delta$ узловая кривая имеет асимптоту, соответствующую половине тетраэдрического угла $\delta=54°44'$. При меньших значениях $\cos\delta$, т. е. при больших углах δ, величина радиуса получается положительной и достигает при $\cos\delta=-1$ минимума, равного

$$\sigma=\frac{2}{1+\sqrt{3}}=0{,}73205.$$

При бóльших значениях $\cos\delta$, т. е. при углах, меньших $54°44'$, значения радиусов будут отрицательными. Следовательно, при таких углах δ нулевые значения вероятностей отсутствуют.

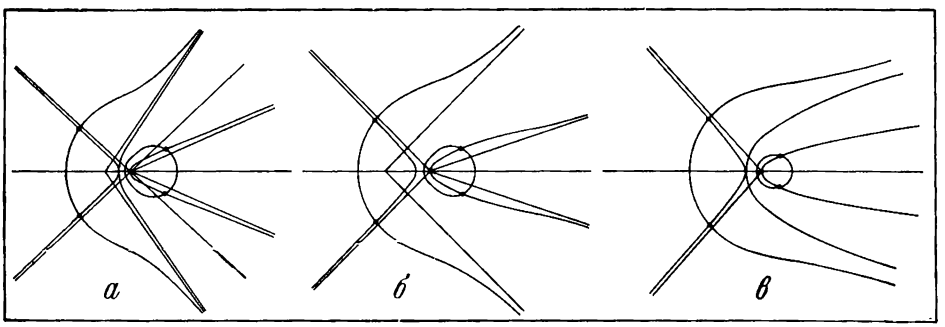


Рис. 4. Характерные кривые для гибридизированных орбиталей
Гибридизация: *а* — $2sp^3$; *б* — $2sp^2$, *в* — $2sp$

На рис. 4, *а* показаны узловые линии для гибридизированной орбитали в любой из плоскостей, проходящих через ось L^3. Таким образом, узловая поверхность представляет собой гиперболоид вращения вокруг оси L^3, особую линию — ось L^3 — и особую точку — начало координат $\sigma=0$. Эта поверхность асимптотически приближается к конической поверхности с тетраэдрическим углом раствора $2\delta=109°28'$. Вершина конуса лежит на оси L^3, но смещена относительно центра атома на величину $\sigma_0=\sqrt{3}=1{,}73205$.

Найдем теперь экстремум функции (18). Для этого сначала положим $\delta=\text{const}$, продифференцируем эту функцию по радиусу σ и приравняем

результат к нулю. После сокращения на выражение, включающее корни, совпадающие с узлами, получим

$$\cos\delta = \frac{\sigma^2 - 6\sigma + 4}{\sqrt{3}\,\sigma\,(\sigma - 4)},$$

$$\sigma = 2 - \frac{1}{\sqrt{3}\cos\delta - 1} \pm \sqrt{4 + \frac{1}{(\sqrt{3}\cos\delta - 1)^2}}. \qquad (25)$$

Такая кривая имеет две ветви в левой и правой частях диаграммы (рис. 4, *а*). При $\cos\delta = 1/\sqrt{3}$ радиус обращается в бесконечность, т. е. кривая имеет асимптоту, идущую под углом, равным половине тетраэдрического.

Для этих кривых радиусы достигают экстремальных значений на оси L^3. Задаваясь значениями углов δ, можно по формуле (25) вычислить соответствующие значения радиусов и провести графическое построение кривых по точкам (рис. 4, *а*). Если полученные таким образом величины δ и σ подставить в формулу (18), то можно вычислить также значения соответствующих максимумов вероятности. Они не остаются постоянными вдоль кривых (25). Каждому углу δ будет соответствовать свой максимум вероятности для своего радиуса σ.

Далее возьмем ту же формулу (18), но примем постоянным значение радиуса σ, продифференцируем функцию по углу и приравняем ее к нулю. После ряда упрощений получим

$$\cos\delta = \frac{\sigma - 2 \pm \sqrt{(\sigma - 2)^2 + 72\sigma^2}}{6\sqrt{3}\,\sigma},$$

отсюда

$$\sigma = \frac{2\cos\delta}{2\sqrt{3} + \cos\delta - 3\sqrt{3}\cos^2\delta}. \qquad (26)$$

Эта кривая также имеет две ветви, обладающие своими асимптотами, которые можно найти по формуле

$$\cos\delta = \frac{1 \pm \sqrt{73}}{6\sqrt{3}},$$

соответственно δ равен 23°19′ и 136°33′.

Зависимость (26) показывает, что для каждого радиуса сферы σ максимум вероятности для электрона располагается под разными углами δ. Величины максимумов в разных местах кривой неодинаковые. Полученные годографы для максимумов нанесены на тот же рис. 4, *а*.

Как видим, для разного порядка нахождения максимумов получаются разные кривые зависимости между радиусами σ и углами δ.

Максимум максиморум вероятности для электрона будет лежать на пересечении кривых (25) и (26). Для нахождения точек пересечения этих годографов необходимо решить их уравнения совместно, т. е. исключить из них одну из переменных — δ или σ. Тогда получим

$$\frac{\sigma^2 - 6\sigma + 4}{\sqrt{3}\,\sigma\,(\sigma - 4)} = \frac{(\sigma - 2) \pm \sqrt{(\sigma - 2)^2 + 72\sigma^2}}{6\sqrt{3}\,\sigma}.$$

После ряда упрощений это уравнение принимает вид

$$\sigma^4 - 6\sigma^3 + 3\sigma^2 + 18\sigma - 4 = 0$$

или

$$\cos^4\delta + \frac{4\sqrt{3}}{9}\cos^3\delta - \frac{25}{9}\cos^2\delta - \frac{2\sqrt{3}}{9}\cos\delta - \frac{12}{9} = 0. \qquad (27)$$

Уравнения (27) можно несколько упростить. Для этого нужно перенести начало координат в точку с нулевым значением третьей производной, что позволит исключить из уравнений член в третьей степени. Однако таким приемом не удается свести их к биквадратным или возвратным уравнениям. Поэтому решение приходится искать либо графическим способом, либо методом итерации.

Все приведенные вычисления проводились для заряда ядра $Z = 1$. Чтобы распространить их на любые значения Z, необходимо формулу (18) и последующие умножить на Z^3, а вместо σ подставить $Z\sigma$. Исследование показывает, что при этом все радиальные размеры оболочки уменьшаются в Z раз, а угловые — не меняются, т. е. оболочки будут подобными.

Чтобы получить наиболее полную картину распределения вероятности пребывания электрона вокруг одной из тройных осей симметрии L^3, целесообразно построить линии равной вероятности для одной из $2sp^3$-орбиталей.

Мы воспользовались формулой (20) и вычислили значения подынтегральных функций через каждые три градуса δ и через каждые 0,1 σ. Затем для каждого значения δ построили в крупном масштабе кривые зависи-

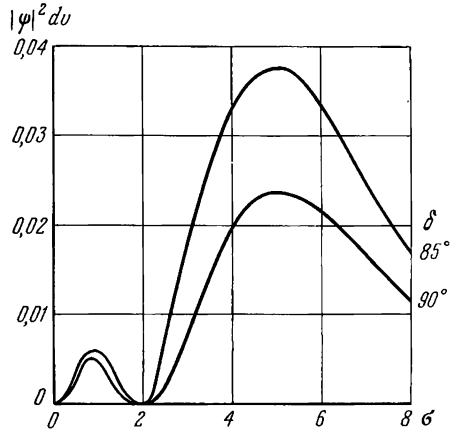


Рис. 5. Пример распределения вероятностей по радиусам σ и углам δ

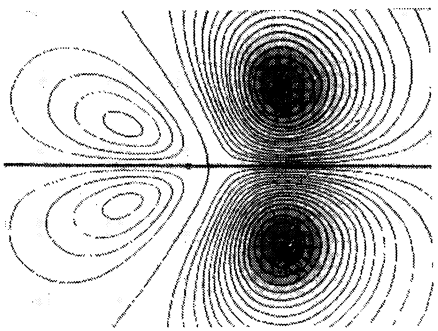


Рис. 6. Изолинии вероятности для $2sp^3$-орбитали

мости подынтегральной функции от безразмерного радиуса σ (рис. 5). Проведя горизонтальные прямые равной вероятности, графическим путем найдем в точках их пересечения с кривыми радиусы равных вероятностей. Нанесем значения радиусов на полярную диаграмму (рис. 6) и затем через полученные точки проведем линии равной вероятности пребывания электрона.

На рис. 6 видно, что максимумы вероятности для электрона располагаются не на оси симметрии орбитали, как это обычно трактуется в литературе, а по обе стороны от нее. Учитывая осевую симметрию $2sp^3$-орбитали, заметим, что эти максимумы образуют в пространстве тороид (кольцо) вокруг данной оси.

Это различие объясняется тем, что при изображении углового распределения обычно ограничиваются рассмотрением только амплитуды или плотности вероятности. Если же рассматривать вместо них саму вероятность для произведения всех составляющих, то плотность вероятности придется умножить на элемент объема, т. е. на величину, пропорциональную $\sigma^2 \sin\delta$ (см. (17)). Так как на оси симметрии этот радиус равен нулю, то и вероятность будет равна нулю, а максимум вероятности сместится с оси на среднюю линию тороида.

Рис. 6 представляет собой сечение одной тороидальной $2sp^3$-орбитали плоскостью, проходящей через ось L^3 (плоскостью чертежа). По мере удаления от средней линии тороида вероятность для электрона падает. Наиболее быстро это падение происходит в направлении к центру атома (0).

В плоскости чертежа форма изолиний приближается к круговой, однако круги не являются концентрическими. Они сближены между собой в направлении к центру атома. Поэтому вероятность быстро уменьшается от средней линии тороида к центру атома и медленно падает в направлении от центра.

На том же рисунке видно, что существуют две зоны вероятного пребывания электрона, разделенные нулевой гиперболической линией, представляющей собой сечение нулевого гиперболоида вращения вокруг оси L^3. С одной стороны от нулевой гиперболы изолинии доходят до вероятности 0,16, а с другой — только до вероятности 0,04. Интегрируя по охватываемой изолиниями площади сечения орбитали, получим, что с одной стороны от нулевой линии электрон будет находиться примерно 96% времени, а по другую сторону от нее — только 4%. Очевидно, что во внимание следует принимать в первую очередь основную часть (96%) орбитали.

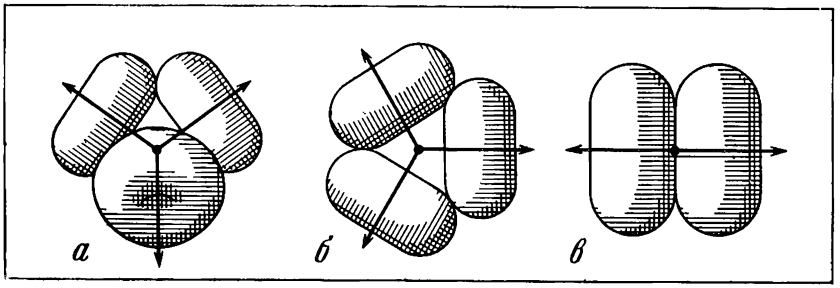


Рис. 7. Формы гибридизированных электронных оболочек
Гибридизация: *а* — $2sp^3$; *б* — $2sp^2$; *в* — $2sp$

Электронная оболочка не имеет резких границ. Чтобы наглядно изобразить ее форму в целом, проведем условную границу тороида по изолинии 2%-ной вероятности. Внутри поверхности вращения, ограниченной этим сечением (внутри тороида), электроны будут находиться приблизительно 95% времени.

Так как у атома имеются четыре одинаковые по форме $2sp^3$-гибридизированные орбитали, оси которых располагаются под тетраэдрическими углами одна к другой, то все вместе они образуют электронную оболочку в виде торотетраэдра, т. е. четырех тороидов, расположенных по тетраэдру (рис. 7, *а*). Для неона такая форма электронной оболочки является основной. В каждом тороиде будут двигаться по 2 электрона.

Изображенная на рис. 6 диаграмма выполнена на основе расчетов по приведенным формулам на ЭВМ. Вычисления производились А. А. Савельевым для случая $Z = 1$. Для иных зарядов ядра форма изолиний останется той же, но радиальный масштаб диаграммы изменится в Z раз. Это приведет к такому же уменьшению размеров электронной оболочки и к обострению максимумов вероятности.

sp^2- и sp-электронная оболочка

Производя аналогичные вычисления для $2sp^2$-гибридизированных орбиталей, получим, что сумма амплитуд вероятности для двух $2p$-состояний будет равна

$$\psi_{p_x} + \psi_{p_y} = \frac{\sigma}{2\sqrt{6}\,e^{\sigma/2}} \sqrt{\frac{3}{4\pi}} (\cos\alpha + \cos\beta). \tag{12.1}$$

Соответствующая двойная ось симметрии будет лежать в плоскости $X0Y$ ($\cos\gamma_1 = 0$, $\cos\alpha_1 = \cos\beta_1$). Отсюда $\cos\alpha_1 = 1/\sqrt{2}$.

Косинус угла между произвольным направлением в пространстве, заданным тремя направляющими косинусами $\cos\alpha$, $\cos\beta$ и $\cos\gamma$ и двойной осью симметрии, лежащей в плоскости $X0Y$, будет равен

$$\cos\delta = \cos\alpha\cos\alpha_1 + \cos\beta\cos\alpha_1 + \cos\gamma\cos\frac{\pi}{2} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\cos\alpha + \cos\beta).$$

Отсюда

$$\cos\alpha + \cos\beta = \sqrt{2}\cos\delta. \tag{13.1}$$

Таким образом, при $\cos\delta = \text{const}$, т. е. на поверхности конуса, описанного вокруг двойной оси симметрии L^2, с углом между образующими, равным 2δ, сумма двух направляющих косинусов остается постоянной. А это значит, что, согласно формуле (12.1), на поверхности этого конуса остается постоянной и сумма амплитуд вероятности $\psi_{p_x} + \psi_{p_y}$. Следовательно, суммарная волновая функция для $2p_x$- и $2p_y$-состояний обладает осевой симметрией относительно двойной оси L^2, лежащей в плоскости $X0Y$.

Производя вычисления, аналогичные предыдущим, найдем, что формула для плотности вероятности гибридизированной $2sp^2$-орбитали будет иметь вид

$$|\psi|^2 = \frac{1}{96\pi e^{\sigma}}[2 - \sigma + \sqrt{2}\sigma\cos\delta]^2. \tag{16.1}$$

Вероятность нахождения электрона в элементарном объеме dv будет равна

$$|\psi|^2 dv = \frac{[(2-\sigma) + \sqrt{2}\sigma\cos\delta]^2\sigma^2 d\sigma\sin\delta\,d\delta\,d\Phi}{96\pi e^{\sigma}}. \tag{18.1}$$

Последнее выражение обращается в нуль при следующих условиях:

Условие	Геометрическое место
$2-\sigma+\sqrt{2}\sigma\cos\sigma = 0$	Узловая линия
$\sigma = 0$	Начало координат
$\sigma = \infty$	В бесконечности
$\sin\delta = 0$	На оси L^2

Из первого условия найдем

$$\sigma = \frac{2}{1 - \sqrt{2}\cos\delta}.$$

Очевидно, что при $\cos\delta = 1/\sqrt{2}$ знаменатель обращается в нуль, а соответствующий радиус — в бесконечность. Следовательно, при таком значении $\cos\delta$ узловая поверхность имеет асимптоту, соответствующую углу 45°. Поверхность имеет форму гиперболоида вращения, вписанного в конус с углом при вершине 90°. Вершина смещена вдоль оси L^2 на величину $2\sqrt{2}$ безразмерных радиусов. Гиперболоид пересекает ось вращения на расстоянии $\sqrt{2} - 1$ безразмерных радиусов. В сечении этого гиперболоида плоскостью чертежа получается равнобокая гипербола.

Находя экстремумы подынтегральной функции аналогично предыдущему получим при дифференцировании по радиусу следующую зависимость

$$\cos\delta = \frac{\sigma^2 - 6\sigma + 4}{\sqrt{2}\sigma(\sigma - 4)},$$

откуда (25.1)

$$\sigma = 2 - \frac{1}{\sqrt{2}\cos\delta - 1} \pm \sqrt{4 + \frac{1}{(\sqrt{2}\cos\delta - 1)^2}}.$$

Дифференцирование по углам конуса δ дает

$$\cos\delta = \frac{\sigma - 2 \pm \sqrt{(\sigma - 2)^2 + 48\sigma^2}}{6\sqrt{2}\sigma},$$

$$\sigma = \frac{2\cos\delta}{2\sqrt{2} + \cos\delta - 3\sqrt{2}\cos^2\delta}. \qquad (26.1)$$

Кривые (25.1) имеют асимптотическую поверхность в виде конуса, для которого $\cos\delta = 1/\sqrt{2}$, т. е. угол между осью и образующей конуса составляет 45°. Кривая (26.1) также имеет асимптотические конические поверхности, отвечающие условию

$$\cos\delta = \frac{1 \pm 7}{6\sqrt{2}}.$$

Откуда

$$\delta = 19°05' \text{ или } \delta = 135°00'.$$

Найдя точки пересечения кривых (25.1) и (26.1), получим возможность подсчитать точки с максимальной вероятностью

$$\frac{\sigma^2 - 6\sigma + 4}{\sqrt{2}\sigma(\sigma - 4)} = \frac{\sigma - 2 \pm \sqrt{(\sigma - 2)^2 + 48\sigma^2}}{6\sqrt{2}\sigma}$$

и (27.1)

$$2 - \frac{1}{\sqrt{2}\cos\delta - 1} \pm \sqrt{4 + \frac{1}{(\sqrt{2}\cos\delta - 1)^2}} = \frac{2\cos\delta}{2\sqrt{2} + \cos\delta - 3\sqrt{2}\cos^2\delta}.$$

Решение этих уравнений снова приводит к выражениям четвертой степени. Поэтому приходится применять графические методы.

Как и в предыдущем случае, мы получаем $2sp^2$-орбиталь в виде тороида, но описанного вокруг оси L^2. Во всей электронной оболочке таких тороидов

три. Их оси L^2 лежат в одной плоскости $X0Y$ под углами 120° одна к другой. Проведя для каждой орбитали граничную поверхность, внутри которой электрон находится 95% времени, получим форму электронной оболочки, изображенную на рис. 7, *б*.

Для $2sp$-гибридизированной орбитали соответствующие формулы примут следующий вид.

Вероятность нахождения электрона в элементарном объеме будет равна

$$|\psi|^2 dv = \frac{[2 - \sigma + \sigma\cos\delta]^2\,\sigma^2 d\sigma \sin\delta d\delta d\Phi}{64\pi e^{\sigma}} . \qquad (18.2)$$

Уравнение узловой линии выглядит так:

$$\sigma = \frac{2}{1 - \cos\delta} .$$

Это уже не гипербола, а парабола. Она образует в пространстве параболоид вращения, который отсекает на оси вращения безразмерный отрезок, равный единице.

Найдя экстремумы подынтегральной функции при дифференцировании по радиусу, получим зависимость

$$\cos\delta = \frac{\sigma^2 - 6\sigma + 4}{\sigma(\sigma - 4)} .$$

Отсюда

$$\sigma = 2 - \frac{1}{\cos\delta - 1} \pm \sqrt{4 + \frac{1}{(\cos\delta - 1)^2}} . \qquad (25.2)$$

Дифференцируя по углам конуса δ, получим

$$\cos\delta = \frac{\sigma - 2 \pm \sqrt{(\sigma - 2)^2 + 24\sigma}}{6\sigma} ,$$

$$\sigma = \frac{2\cos\delta}{2 + \cos\delta - 3\cos^2\delta} . \qquad (26.2)$$

Совместное решение уравнений (25.2) и (26.2) позволяет получить уравнения для определения максимум максиморум вероятности. Но эти уравнения также четвертой степени и потому требуют графического решения.

Снова $2sp$-орбиталь получается в виде тороида вокруг оси $0X$. Тороидов в электронной оболочке два. Форма граничной поверхности такой оболочки изображена на рис. 7, *в*.

Обобщая изложенное, необходимо отметить следующее.

Целесообразно для расчетов гибридизированных орбиталей обычную сферическую систему координат заменить угловой, с направляющими косинусами. Это позволяет получить все волновые функции для $2p$-электронов однотипными (11).

Показано, что все гибридизированные орбитали являются осесимметричными. Каждая орбиталь имеет форму тороида; $2sp$-гибридизированная оболочка представляет собой два соосных тороида; $2sp^2$-оболочка — три тороида, оси симметрии которых расположены в одной плоскости под углом 120° одна к другой; $2sp^3$-оболочка состоит из четырех тороидов, оси симметрии которых расположены под тетраэдрическими углами (см. рис. 7).

Все гибридизированные орбитали имеют узловые поверхности в виде $2sp$-параболоида вращения, $2sp^2$-гиперболоида вращения, вписанного в ко-

нус с прямым углом при вершине, $2sp^3$-гиперболоида вращения с тетраэдрическим углом при вершине.

Даны формулы для расчета наивероятнейших размеров тороидов — (27) и (27.1) . Они приводят к уравнениям четвертой степени. Решение приходится находить графическим путем. Расчеты произведены для $Z = 1$. При увеличении заряда ядра угловые размеры оболочек сохраняются, а радиальные — уменьшаются в Z раз. Оболочки остаются подобными.

5. Описанные тороидальные формы электронных оболочек были нами получены ранее [27, 28] из соображений симметрии и принципа наименьшей помехи одного электрона другому. Настоящие расчеты, выполненные методами квантовой механики, подтвердили наши прежние выводы [29].

d-электронная оболочка

Рассмотрим теперь волновые функции для $3d$-электронов [14].

$$
\begin{aligned}
\psi 3d_{z^2} &= \frac{1}{81\sqrt{6\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{\sigma^2}{e^{\sigma/3}}(3\cos^2\theta - 1),\\
\psi 3d_{xz} &= \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{\sigma^2}{e^{\sigma/3}}\sin\theta\cos\theta\cos\varphi,\\
\psi 3d_{yz} &= \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{\sigma^2}{e^{\sigma/3}}\sin\theta\cos\theta\sin\varphi,\\
\psi 3d_{x^2-y^2} &= \frac{1}{81\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{\sigma^2}{e^{\sigma/3}}\sin^2\theta\cos 2\varphi,\\
\psi 3d_{xy} &= \frac{1}{81\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{\sigma^2}{e^{\sigma/3}}\sin^2\theta\sin 2\varphi,
\end{aligned}
\tag{28}
$$

где

$$\sigma = \frac{Z}{a_0}r.$$

Как видим, все пять волновых функций описываются разными уравнениями и усмотреть симметрию и аналогию различных волновых функций весьма затруднительно.

Для упрощения этих формул прежде всего перейдем от обычной сферической системы координат к угловой (9). Тогда получим общую часть для радиальной составляющей волновой функции

$$R = \frac{1}{81\sqrt{6\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{\sigma^2}{e^{\sigma/3}}.$$

Для угловых составляющих найдем выражения

$$
\begin{aligned}
\psi 3d_{z^2} &= R(3\cos^2\gamma - 1),\\
\psi 3d_{xz} &= 2\sqrt{3}\,R\cos\gamma\cos\alpha,\\
\psi 3d_{yz} &= 2\sqrt{3}\,R\cos\gamma\cos\beta,\\
\psi 3d_{x^2-y^2} &= \sqrt{3}\,R(\cos^2\alpha - \cos^2\beta),\\
\psi 3d_{xy} &= 2\sqrt{3}\,R\cos\alpha\cos\beta.
\end{aligned}
\tag{29}
$$

Теперь легко заметить, что вторая, третья и пятая волновые функции получились одинаковыми по своей структуре. Однако первая и четвертая отличаются одна от другой и от остальных трех формул.

Для преобразования первой волновой функции напомним, что между направляющими косинусами одного и того же радиуса в пространстве существует известное соотношение (10)

$$\cos^2\alpha + \cos^2\beta + \cos^2\gamma = 1.$$

Подставив его в выражение для первой волновой функции, найдем

$$(3\cos^2\gamma - 1) = 2\cos^2\gamma - \cos^2\alpha - \cos^2\beta = (\cos^2\gamma - \cos^2\alpha) + (\cos^2\gamma - \cos^2\beta).$$

Как известно, при умножении волновой функции на постоянный коэффициент она также остается решением уравнения Шредингера. Умножив первую волновую функцию на $\sqrt{3}$, найдем (нормируем позже)

$$\psi 3d_{z^2} = \sqrt{3}\,R(\cos^2\gamma - \cos^2\alpha) + \sqrt{3}\,R(\cos^2\gamma - \cos^2\beta),$$

$$\psi 3d_{xz} = 2\sqrt{3}\,R\cos\gamma\cos\alpha,$$

$$\psi 3d_{yz} = 2\sqrt{3}\,R\cos\gamma\cos\beta,$$

$$\psi 3d_{x^2-y^2} = \sqrt{3}\,R(\cos^2\alpha - \cos^2\beta),$$

$$\psi 3d_{xy} = 2\sqrt{3}\,R\cos\alpha\cos\beta.$$

Нетрудно заметить, что первая волновая функция оказалась составной. Она распадается на два слагаемых, аналогичных четвертой функции.

Теперь легко можно разбить все угловые составляющие волновых функций на две группы, одна из которых представляет собой разность квадратов направляющих косинусов, а другая — их произведение,

$$\psi_1 = \cos^2\gamma - \cos^2\alpha, \qquad \psi_4 = \cos\gamma\cos\alpha,$$

$$\psi_2 = \cos^2\gamma - \cos^2\beta, \qquad \psi_5 = \cos\gamma\cos\beta,$$

$$\psi_3 = \cos^2\alpha - \cos^2\beta, \qquad \psi_6 = \cos\alpha\cos\beta.$$

Очевидно, что каждая из этих формул может быть взята как с положительным, так и с отрицательным знаком.

Беря парные комбинации первых трех составляющих первой группы, получим выражения

$$\psi_3 - \psi_1 = 3\cos^2\alpha - 1,$$

$$-\psi_2 - \psi_3 = 3\cos^2\beta - 1,$$

$$\psi_1 + \psi_3 = 3\cos^2\gamma - 1.$$

В каждой из этих комбинаций фигурирует только один из направляющих косинусов. Поэтому они обладают осевой симметрией относительно координатных осей $0X$, $0Y$ и $0Z$, т. е. относительно четверных осей симметрии. Эти выражения будут справедливы относительно положительного и отрицательного направления осей.

Беря сумму всех трех составляющих второго типа, получим для положительного направления всех трех координатных осей следующее выражение

угловой составляющей:

$$\psi_6 + \psi_5 + \psi_4 = \cos\alpha\cos\beta + \cos\beta\cos\gamma + \cos\gamma\cos\alpha = \\ = \frac{\cos\alpha\,(\cos\beta + \cos\gamma)}{2} + \frac{\cos\beta\,(\cos\gamma + \cos\alpha)}{2} + \frac{\cos\gamma\,(\cos\alpha + \cos\beta)}{2}.$$

Как было показано, для тройной оси симметрии все направляющие косинусы равны

$$\cos\alpha_1 = \cos\beta_1 = \cos\gamma_1 = \frac{1}{\sqrt{3}}.$$

Косинус угла δ между осью L^3 и любым радиусом, заданным направляющими косинусами $\cos\alpha$, $\cos\beta$ и $\cos\gamma$, будет равен

$$\cos\delta = \frac{1}{\sqrt{3}}(\cos\alpha + \cos\beta + \cos\gamma),$$

отсюда

$$\cos\beta + \cos\gamma = \sqrt{3}\cos\delta - \cos\alpha,$$
$$\cos\gamma + \cos\alpha = \sqrt{3}\cos\delta - \cos\beta,$$
$$\cos\alpha + \cos\beta = \sqrt{3}\cos\delta - \cos\gamma.$$

Подставив эти величины в выражение для суммы второй группы волновых функций, найдем

$$\psi_6 + \psi_5 + \psi_4 = {}^1/_2\,[\cos\alpha\,(\sqrt{3}\cos\delta - \cos\alpha) + \\ + \cos\beta\,(\sqrt{3}\cos\delta - \cos\beta) + \cos\gamma\,(\sqrt{3}\cos\delta - \cos\gamma)].$$

После ряда элементарных преобразований получим

$$\psi_6 + \psi_5 + \psi_4 = {}^1/_2\,(3\cos^2\delta - 1).$$

Таким образом, мы имеем выражение с осевой симметрией относительно тройной оси L^3. Меняя знаки у составляющих волновой функции, получим аналогичные выражения относительно всех четырех тройных осей симметрии декартовой системы координат.

Введя новую индексацию волновых функций и нормируя их к единице, получим выражения

$$\psi_1 = \psi_2 = \frac{1}{81\sqrt{6\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{\sigma^2}{e^{\sigma/3}}(3\cos^2\alpha - 1),$$
$$\psi_3 = \psi_4 = \frac{1}{81\sqrt{6\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{\sigma^2}{e^{\sigma/3}}(3\cos^2\beta - 1),$$
$$\psi_5 = \psi_6 = \frac{1}{81\sqrt{6\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{\sigma^2}{e^{\sigma/3}}(3\cos^2\gamma - 1), \qquad (30)$$
$$\psi_7 = \psi_8 = \psi_9 = \psi_{10} = \frac{1}{81\sqrt{6\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{\sigma^2}{e^{\sigma/3}}(3\cos^2\delta - 1).$$

Радиальная составляющая для всех волновых функций получилась одинаковой. Необходимо только помнить, что в нее нужно подставлять вместо атомного номера Z или заряда ядра его эффективный заряд с учетом экранирования $(Z - b)$.

Все волновые функции для $3d$-электронов по угловой составляющей распадаются на две группы или подоболочки.

Первая состоит из шести функций. Каждая пара из них обладает осевой симметрией относительно одной из координатных осей: $0X$, $0Y$ или $0Z$. Углы α, β и γ при этом отсчитываются как от положительного, так и от отрицательного направления осей. Таким образом, эта группа в целом обладает октаэдрической симметрией.

Вторая группа состоит из четырех функций. Все они аналогичны и вместе обладают тетраэдрической симметрией. Выражение для угловой части волновой функции получается подобным первой группе, но угол δ отсчитывается от тройных осей симметрии, а не от координатных. Все десять волновых функций $3d$-электронов в целом обладают кубической симметрией.

Поскольку $3d$-оболочка распадается на две неравные части, для первой подоболочки следует брать экранирующий заряд шестого изоэлектронного ряда, а для второй — десятого ряда этой оболочки (для четвертого периода таблицы Менделеева — для 24-го и 28-го изоэлектронных рядов). Радиусы подоболочек будут разными. К аналогичному выводу мы пришли раньше [27, 28], исходя из принципа наименьшей экранировки. Таким образом, этот принцип получил дополнительное подтверждение и для случая $3d$-электронов.

Система (28) ортогональна, но асимметрична, а система (30) пространственно симметрична, но не ортогональна. Для соблюдения всех требований нужно при гибридизации добавить сферически-симметричную волновую функцию $4s$-электронов [30].

Если выражения (30) для амплитуды вероятности возвести в квадрат, затем умножить на дифференциал объема (17) и далее произвести интегрирование по углам Ф относительно осей координат и тройных осей симметрии, то

для октаэдрической подоболочки

$$\int\limits_v |\psi|^2\,dv = \frac{1}{81^2\cdot 3}\int\limits_0^\infty \left(\frac{Z}{a_0}\right)^3 \frac{\sigma^6}{e^{2\sigma/3}}\,d\sigma \int\limits_0^\pi (3\cos^2\alpha - 1)^2 \sin\alpha\, d\alpha;$$

для тетраэдрической подоболочки

$$\int\limits_v |\psi|^2\,dv = \frac{1}{81^2\cdot 3}\int\limits_0^\infty \left(\frac{Z}{a_0}\right)^3 \frac{\sigma^6}{e^{2\sigma/3}}\,d\sigma \int\limits_0^\pi (3\cos^2\delta - 1)^2 \sin\delta\, d\delta.$$

Аналогичные функции получаются для октаэдрической подоболочки и для углов β и γ.

Как видим, в подынтегральных функциях радиальная и угловая составляющие волновых функций разделены. Это дает возможность дифференцировать их и находить максимумы вероятности раздельно.

Для радиальной составляющей максимум будет находиться на поверхностях сфер существенно большего диаметра, чем для $2s^2p^6$-электронных оболочек. Для угловых составляющих максимумы вероятности будут лежать на поверхностях конусов вокруг четверных и тройных осей симметрии. Расчет показывает, что угол между осью и образующими этих конусов равен 21°30′, т. е. примерно вчетверо меньше, чем для тороидов $2s^2p^6$-оболочек. При этом тороидальное электронное облако более близко к сферическому.

Необходимо отметить, что расчетный угол конуса оказался довольно близким к углу конуса анизотропии для электрона, который равен 22°18′.

Поэтому конуса анизотропии электронов $3d$-оболочки будут отклоняться от ядра атома всего на 0°48′.

Обобщая изложенное в данной главе, необходимо отметить следующее.

1. Для гибридизированных орбиталей различных типов целесообразно заменить обычную сферическую систему координат системой из трех направляющих косинусов, отсчитываемых от декартовых осей координат.

2. Все гибридизированные орбитали являются осесимметричными.

3. Целесообразно о форме электронных облаков судить не отдельно по радиальной и угловой составляющим, а по их произведению для вероятности, а не для амплитуды или плотности вероятности. В этом представлении электронные облака приобретают вид тороидов вокруг осей симметрии. Тороиды для sp-, sp^2- и sp^3-оболочек видны из центра атома под существенно бóльшим углом по сравнению с тороидами для $3d$-электронов.

4. Форма электронных оболочек получается следующей: для sp-электронов — два соосных тороида, для sp^2-электронов — три тороида, оси которых располагаются в одной плоскости под углами 120° одна к другой, для sp^3-электронов — четыре тороида, оси которых располагаются под тетраэдрическими углами (торотетраэдр). Для $3d$-электронов образуются две подоболочки: одна меньшая, октаэдрическая, в которой оси тороидов совпадают с положительными и отрицательными направлениями осей координат, и вторая — бóльшая, тетраэдрическая, где оси четырех тороидов располагаются по пространственным диагоналям куба.

Литература

1. *Б. М. Кедров, Д. Н. Трифонов.* Закон периодичности и химические элементы. Открытия и хронология. М., «Наука», 1969.
2. *В. Н. Кондратьев.* Структура атомов и молекул. М., Физматгиз, 1959.
3. *Г. Бете, Э. Солпитер.* Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. Физматгиз, 1960.
4. *В. Г. Левич, Ю. А. Вдовин, В. А. Мямлин.* Курс теоретической физики, т. II. М., Физматгиз, 1962.
5. *А. С. Давыдов.* Квантовая механика. М., Физматгиз, 1963.
6. *Э. В. Шпольский.* Атомная физика, т. I. М., Физматгиз, 1963.
7. *Д. И. Блохинцев.* Основы квантовой механики. М., «Высшая школа», 1963.
8. *Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц.* Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М., Физматгиз, 1963.
9. *Д. Бом.* Квантовая теория. М., «Наука», 1965.
10. *В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский.* Релятивистская квантовая теория, ч. 1. М., «Наука», 1968.
11. *И. Г. Каплан.* Симметрия многоэлектронных систем. М., «Наука», 1969.
12. *В. Г. Левич, Ю. А. Вдовин, В. А. Мямлин.* Курс теоретической физики, т. II. М., «Наука», 1971.
13. *А. С. Давыдов.* Квантовая механика. М., «Наука», 1973.
14. *Г. Эйринг, Д. Уолтер, Д. Кимбалл.* Квантовая химия. М., Гос. изд-во иностр. лит., 1948.
15. *М. А. Ельяшевич.* Атомная и молекулярная спектроскопия. М., Физматгиз, 1962.
16. *Ч. Коулсон.* Валентность. М., «Мир», 1965.
17. *С. А. Щукарев.* Неорганическая химия. М., «Высшая школа», 1970.
18. *Д. П. Григорьев.* Основы конституции минералов. М., «Недра», 1966.
19. *Г. Грей.* Электроны и химическая связь. М., «Мир», 1967.
20. *Дж. Маррел, С. Кеттл, Д. Теддер.* Теория валентности. М., «Мир», 1968.
21. *М. В. Базилевский.* Метод молекулярных орбит и реакционная способность органических молекул. М., «Химия» 1969.
22. Структура и связь, т. II. М., «Мир», 1969.
23. *М. Дьюар.* Теория молекулярных орбиталей в органической химии. М., «Мир», 1972.
24. *М. Грин.* Металлоорганические соединения переходных элементов. М., «Мир», 1972.

25. *A. R. von Hippel.* Molecular Science and Molecular Engineering. Chapman and Hall. London, 1959.
26. *Б. Н. Бушманов, Ю. А. Хромов.* Физика твердого тела. М., «Высшая школа», 1971.
27. *М. М. Протодьяконов.* Свойства минералов и их электронное строение. М., «Наука», 1965.
28. *М. М. Протодьяконов.* Свойства и электронное строение породообразующих минералов. М., «Наука». 1969.
29. *М. М. Протодьяконов.* Симметрия электронных оболочек атомов. Симметрия в природе. Л., Изд. Гос. научн.-техн. горн. об-ва, 1971.
30. *М. М. Протодьяконов.* Симметричные гибридизированные электронные оболочки. Строение минералов и горных пород. М., изд. ИФЗ АН СССР, 1975.

Глава 2

МЕХАНИЧЕСКИЕ И МАГНИТНЫЕ МОМЕНТЫ ЭЛЕКТРОНОВ В АТОМАХ

Некоторое суждение о строении электронных оболочек атомов можно получить из анализа квантования момента количества движения электрона и его проекции на одну из осей симметрии. В самом деле, квантованная величина механического момента количества движения электрона, как известно [1], описывается формулой

$$M = \hbar \sqrt{l(l+1)},$$

где l — азимутальное квантовое число.

Проекция этого момента на некоторое направление $0Z$ дает соответствующий магнитный момент

$$M_Z = \hbar m,$$

где m — магнитное квантовое число, которое может принимать $2l + 1$ целочисленных значений от l до $-l$.

Разделив приведенные выражения на постоянную Планка $\hbar$, можно получить безразмерные выражения для механического и магнитного моментов (табл. 25).

Таблица 25

Безразмерные величины орбитальных моментов электронов

l	$\sqrt{l(l+1)}$	m
0	$\sqrt{0} = 0{,}00$	0
1	$\sqrt{2} = 1{,}41$	1 0 −1
2	$\sqrt{6} = 2{,}45$	2 1 0 −1 −2
3	$\sqrt{12} = 3{,}46$	3 2 1 0 −1 −2 −3
4	$\sqrt{20} = 4{,}47$	4 3 2 1 0 −1 −2 −3 −4

В работах по квантовой механике, например в [2], обычно указывается, что две другие проекции момента количества движения электрона — M_x и M_y — остаются неопределенными. Это так.

Однако нетрудно понять, что их геометрическую сумму $\sqrt{M_x^2 + M_y^2}$ можно найти просто по теореме Пифагора, так как нам известна гипотенуза и один из катетов прямоугольного треугольника:

$$\frac{\sqrt{M_x^2 + M_y^2}}{\hbar} = \sqrt{l(l+1) - m^2}.$$

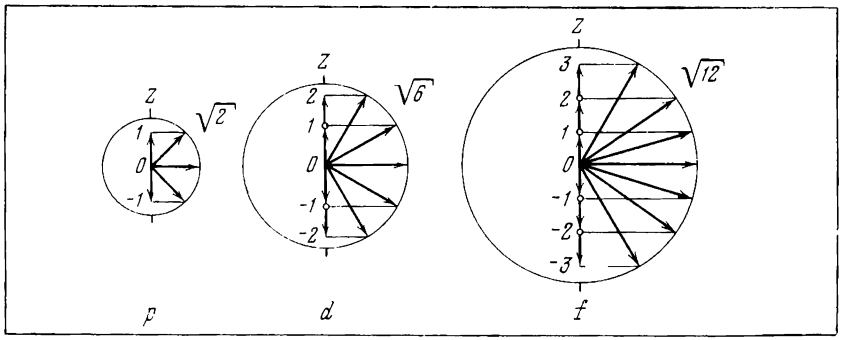


Рис. 1. Схема квантования механических и магнитных моментов атомов

Проведя окружность радиуса $\sqrt{l(l+1)}$ и отложив по вертикальному диаметру значения m, можно графическим путем получить угол θ между механическим моментом количества движения M и его проекцией M_Z на выбранную ось $0Z$ (рис. 1). Косинус этого угла выражается очевидной формулой

$$\cos\theta = \frac{m}{\sqrt{l(l+1)}}.$$

Значения косинусов угла θ сведены в табл. 26.

Найденная составляющая момента, перпендикулярная к оси $0Z$, известна по величине, но не известна по направлению, т. е. будет лежать в плоскости, перпендикулярной к оси $0Z$.

Таблица 26

Величина $\cos\theta$

l	m								
	4	3	2	1	0	−1	−2	−3	−4
0	—	—	—	—	0	—	—	—	—
1	—	—	—	$1:\sqrt{2}$	0	$-1:\sqrt{2}$	—	—	—
2	—	—	$2:\sqrt{6}$	$1:\sqrt{6}$	0	$-1:\sqrt{6}$	$-2:\sqrt{6}$	—	—
3	—	$3:\sqrt{12}$	$2:\sqrt{12}$	$1:\sqrt{12}$	0	$-1:\sqrt{12}$	$-2:\sqrt{12}$	$-3:\sqrt{12}$	—
4	$4:\sqrt{20}$	$3:\sqrt{20}$	$2:\sqrt{20}$	$1:\sqrt{20}$	0	$-1:\sqrt{20}$	$-2:\sqrt{20}$	$-3:\sqrt{20}$	$-4:\sqrt{20}$

Сам же механический момент количества движения M известен по величине, но не известен по направлению. Он будет расположен вдоль одной из образующих конуса вокруг оси $0Z$ под углом θ к ней. Это явление можно рассматривать как прецессию, вызванную действием не внешнего, а внутреннего магнитного поля атома (например, магнитного поля ядра). Внешнее магнитное поле сможет ориентировать в пространстве направление оси $0Z$ этого конуса прецессии и увеличивать или уменьшать ее угловую скорость.

Как видно из табл. 26, для $m = 0$ значение косинуса угла прецессии получается равным нулю. Это может быть истолковано так, что для данного случая вследствие очень сильной прецессии вектор (точнее, псевдовектор) механического момента M орбитального движения все время остается перпендикулярным к оси прецессии и вращается вокруг нее. Поэтому не только его проекция на ось $0Z$ равна нулю, но и среднее значение за некоторый промежуток времени получается равным нулю.

Описанная картина пространственного квантования относится к одноэлектронным атомам и ионам. При переходе к многоэлектронным атомам обычно делается правдоподобное предположение о том, что волновые функции многоэлектронных атомов или ионов остаются теми же, что и для одноэлектронного атома, но каждый из электронов в этих функциях характеризуется иной совокупностью четырех квантовых чисел n, l, m и s, а также соответствующими им энергиями и моментами.

Далее двумя способами производится сложение получившихся моментов или пропорциональных им безразмерных чисел: 1) сначала складываются орбитальные моменты всех электронов ($L = \Sigma m$), затем — все спиновые моменты ($S = \Sigma s$) и, наконец, полученные результаты ($J = L + S$); 2) первоначально суммируются орбитальные и спиновые моменты для каждого электрона в отдельности ($j = m + s$), а затем — результаты ($J = \Sigma j$).

Так как суммирование связано с прецессией, вызываемой взаимодействием складываемых псевдовекторов, то конечный результат неодинаков — он зависит от порядка суммирования. Все остальные случаи взаимодействия моментов находятся между этими крайними пределами.

Нормальным случаем взаимодействия считается первый.

Приводим пример суммирования:

l	m	L
0	0	0
1	1	1
	1+0	1
	1+0−1	0
2	2	2
	2+1	3
	2+1+0	3
	2+1+0−1	2
	2+1+0−1−2	0
3	3	3
	3+2	5
	3+2+1	6
	3+2+1+0	6
	3+2+1+0−1	5
	3+2+1+0−1−2	3
	3+2+1+0−1−2−3	0

Для каждого значения l величины L берутся сначала со знаком минус, а затем повторяются со знаком плюс. Наоборот, при суммировании спинов первоначально складываются все положительные спины, а затем к ним добавляются все отрицательные. При этом некоторые суммарные моменты J получаются отрицательными, а другие — положительными. Иногда в литературе приводятся только абсолютные значения моментов J без указания их знаков. Так же раньше поступали и мы [3].

Пока речь шла о суммировании проекций моментов на выбранную ось $0Z$, оно выполнялось арифметически. При переходе к механическим моментам количества движения для учета геометрического квантового характера этого сложения и того обстоятельства, что гиромагнитные отношения спиновых и орбитальных моментов различаются вдвое, окончательный результат приходится умножать на специальный множитель Ланде [1, 2, 4—8]

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} .$$

В этом случае для расчетов используются абсолютные значения моментов.

Если $J = S + L$,

$$g = 2 - \frac{L}{J} .$$

Когда же S и L направлены в разные стороны, следует пользоваться полной формулой для расчета величины g.

Теоретический расчет возможных значений множителя Ланде приведен в работе М. А. Ельяшевича [1]. Магнитные моменты атомов, вычисленные с учетом этого множителя, приведены в книге Я. Д. Дорфмана [4], но в ней имеются отдельные неточности. Так, при $J = 0$ множитель Ланде равняется $1 + 0/0$, т. е. является неопределенным или может быть принят равным двум. Между тем в табл. 4 книги Я. Г. Дорфмана везде указано, что для этих случаев $g = 0$. Правда, при этом окончательное значение магнитного момента gJ в магнетонах Бора все равно получается равным нулю. Кроме того, в той же таблице ошибочно указан терм для азота.

Для иллюстрации в табл. 27 приведены результаты расчета величины множителя Ланде g и магнитных моментов атомов gJ в магнетонах Бора для идеализированной схемы, не учитывающей перекрывания энергетических уровней в начале изоэлектронных рядов для d- и f-электронов.

Чтобы сделать таблицу более наглядной, изобразим изменение входящих в нее величин на диаграмме (рис. 2).

Анализируя полученные данные, видим, что вместе с ростом l одновременно увеличивается и суммарный орбитальный момент, зависящий от L. Рост имеет периодический характер. Каждая группа электронов s, p, d и f делится на две одинаковые подгруппы, в которых L сначала растет по абсолютной величине, а затем уменьшается до нуля. Одна группа является отрицательной, а другая — положительной. В нашей работе 1969 г. были указаны только абсолютные значения моментов [3].

Суммарный спин электронов S в каждой группе сначала растет, а затем уменьшается до нуля. С ростом l максимальные значения S увеличиваются.

Так как в каждой группе электронов орбитальные и спиновые моменты сначала вычитаются, а затем складываются, величины подгрупп получаются неодинаковыми — первая подгруппа оказывается меньше второй как по числу электронов, так и по абсолютной величине моментов gJ. Зато возникает равенство смежных подгрупп в соседних группах.

Таблица 27

Моменты и множитель Ланде g

Состояние электронов	L	S	J	g	gJ	Состояние электронов	L	S	J	g	gJ
s^1	0	1/2	1/2	2	1	f^1	—3	1/2	—5/2	6/7	—15/7
s^2	0	0/2	0/2	2	0	f^2	—5	2/2	—8/2	4/5	—16/5
						f^3	—6	3/2	—9/2	8/11	—36/11
p^1	—1	1/2	—1/2	2/3	—1/3	f^4	—6	4/2	—8/2	3/5	—12/5
p^2	—1	2/2	0/2	2	0	f^5	—5	5/2	—5/2	2/7	—5/7
p^3	0	3/2	3/2	2	3	f^6	—3	6/2	0/2	2	0
p^4	1	2/2	4/2	3/2	3	f^7	0	7/2	7/2	2	7
p^5	1	1/2	3/2	4/3	2	f^8	3	6/2	12/2	3/2	9
p^6	0	0/2	0/2	2	0	f^9	5	5/2	15/2	4/3	10
						f^{10}	6	4/2	16/2	5/4	10
d^1	—2	1/2	—3/2	4/5	—6/5	f^{11}	6	3/2	15/2	6/5	9
d^2	—3	2/2	—4/2	2/3	—4/3	f^{12}	5	2/2	12/2	7/6	7
d^3	—3	3/2	—3/2	2/5	—3/5	f^{13}	3	1/2	7/2	8/7	4
d^4	—2	4/2	0/2	2	0	f^{14}	0	0/2	0/2	2	0
d^5	0	5/2	5/2	2	5						
d^6	2	4/2	8/2	3/2	6						
d^7	3	3/2	9/2	4/3	6						
d^8	3	2/2	8/2	5/4	5						
d^9	2	1/2	5/2	6/5	3						
d^{10}	0	0/2	0/2	2	0						

Множитель Ланде g в каждой подгруппе сначала уменьшается, а затем возрастает. Вследствие этого разница в величинах магнитных моментов gJ в подгруппах каждой группы увеличивается.

Для сравнения на том же чертеже приведены значения магнитных моментов атомов с учетом существующего перекрывания энергетических уровней [4]. Как видно, перекрывание энергетических уровней для ds- и fs-электронов приводит к появлению резких пиков и нарушению подобия между $3d^{10}$-, $4d^{10}$- и $5d^{10}$-, а также между $4f^{14}$- и $5f^{14}$-оболочками.

Обычно в литературе графическое изображение механических и магнитных моментов многоэлектронных атомов дается в виде векторных диаграмм типа рис. 1. Эти условные диаграммы изображаются в плоскости. В соответствии с ТФП, которой мы здесь пользуемся, можно произвести сложение соответствующих векторов, но только в одном подпространстве. Ряд свойств электронов в атоме, например связанных с излучением, невозможно описать, опираясь только на динамику их механического движения в первом подпространстве. При таком подходе рассмотрение диаграмм теряет условность и приобретает ясный физический смысл.

Нам представляется более правильным изображать все операции по сложению моментов не на плоской, а на пространственной диаграмме, которая позволяет в целях иллюстрации наглядно показать взаимное расположение всех моментов.

Покажем это на примере атома углерода.

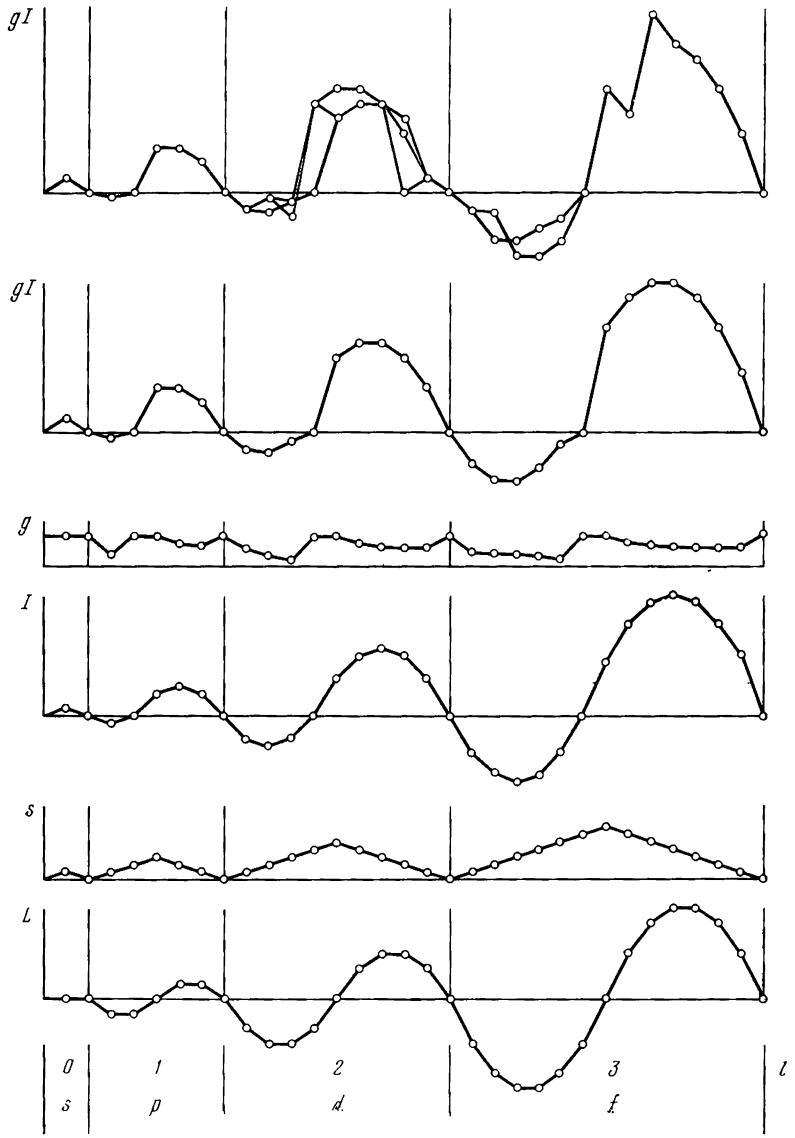


Рис. 2. Изменение механических и магнитных моментов многоэлектронных атомов

Прежде всего, вместо неподвижной лабораторной системы координат будем рассматривать механические и магнитные моменты во вращающейся при прецессии системе координат. Начало координат разместим в центре атома, ось $0Z$ направим по оси прецессии электронной оболочки, а плоскость $X0Z$ проведем через эту ось и вектор механического момента первого $2p^1$-электрона. Ось $0Y$ направим перпендикулярно к этой плоскости.

Величины, пропорциональные механическим моментам $L^* = \sqrt{L(L+1)}$, $S^* = \sqrt{S(S+1)}$ и $J^* = \sqrt{J(J+1)}$, будем откладывать под такими угла-

ми к оси $0Z$, чтобы их проекции на нее были равны соответственно L, S и J. Тогда проекции этих моментов на направления, перпендикулярные к оси $0Z$, будут по величинам равны соответственно $\sqrt{L(L+1)-L^2}=\sqrt{L}$, $\sqrt{S(S+1)-S^2}=\sqrt{S}$ и $\sqrt{J(J+1)-J^2}=\sqrt{J}$. При этом их направления относительно вращающейся системы координат можно будет вычислять. Однако в неподвижной лабораторной системе координат эти направления относительно осей $0X$ и $0Y$ по-прежнему будут неопределенными.

Рассчитанные для четырех внешних $2s^2p^2$-электронов атома углерода значения моментов, направленных кверху, будем считать положительными, а направленных книзу — отрицательными.

Пользуясь этими данными, построим пространственные графики моментов (рис. 3). Ось $0Z$ направим вертикально вверх. Построение будем вести в двух проекциях. Вверху разместим вертикальную плоскость проекции $X0Z$, а внизу — горизонтальную $X0Y$, перпендикулярную к этой оси. На верхней проекции проведем круги, радиусы которых будут пропорциональны величинам $\sqrt{L(L+1)}$, $\sqrt{S(S+1)}$ и $\sqrt{J(J+1)}$, а на нижней — круги с радиусами $\sqrt{L}$, $\sqrt{S}$ и $\sqrt{J}$. Орбитальные моменты для $1s^2$-электронов, поскольку они равны нулю, изображать не будем.

Рассмотрим мгновенное расположение моментов для $2s^1$-электронов (рис. 3, *а*). Для них орбитальный момент $L=0$. Поэтому останутся только чисто спиновые моменты $S^*=J^*$, которые дадут одну и ту же проекцию $S=J$ на ось $0Z$. Перпендикулярная к ней проекция $\sqrt{S}=\sqrt{J}$ будет непрерывно вращаться вокруг оси $0Z$ и потому в среднем окажется эквивалентной нулю.

Для двух $2s^2$-электронов (рис. 3, *б*) орбитальный момент по-прежнему будет равен нулю, а спиновые моменты расположатся антипараллельно один другому. Поэтому их сумма S^* и проекция на ось $0Z$, а также величины J^* и J будут равны нулю. Оба направленных в противоположные стороны спиновых момента будут вращаться вокруг оси $0Z$. Но даже независимо от наличия этого вращения (прецессии) их суммарная проекция на любое направление, в том числе и на перпендикулярное к оси $0Z$, будет всегда равна нулю.

Чтобы геометрические и квантовые суммы всех орбитальных и спиновых моментов $2p^2$-электронов и их проекции на ось $0Z$ в точности соответствовали одна другой (были бы самосогласованы), необходимо направлять их во вращающейся системе координат следующим образом.

Орбитальные моменты каждого из двух $2p^2$-электронов, равные по абсолютной величине $L=\sqrt{2}=1{,}41$, должны быть направлены для первого электрона в плоскости $X0Z$ кверху, под углом 45° к положительному направлению оси $0Z$; а для второго — в плоскости $X0Y$, под углом 135° к оси $0X$ и перпендикулярно к оси $0Z$. Тогда угол между этими двумя моментами будет равен 120°. Их геометрическая сумма также получится равной $\sqrt{2}=1{,}41$ и направленной в плоскости $Y0Z$ вверх, под углом 45° к оси $0Z$.

Спиновые моменты обоих $2p^2$-электронов равны по абсолютной величине $S=\sqrt{3/4}=0{,}87$ и направлены вниз под углами, равными половине тетраэдрического угла (54°44′), к оси $0Z$. Угол между обоими спиновыми моментами дополнит тетраэдрический угол до 180°, т. е. составит 70°32′. Их геометрическая сумма получится равной $\sqrt{2}=1{,}41$ и будет направлена в плоскости $Y0Z$ вниз под углом 45° к оси $0Z$. Проекции спиновых моментов

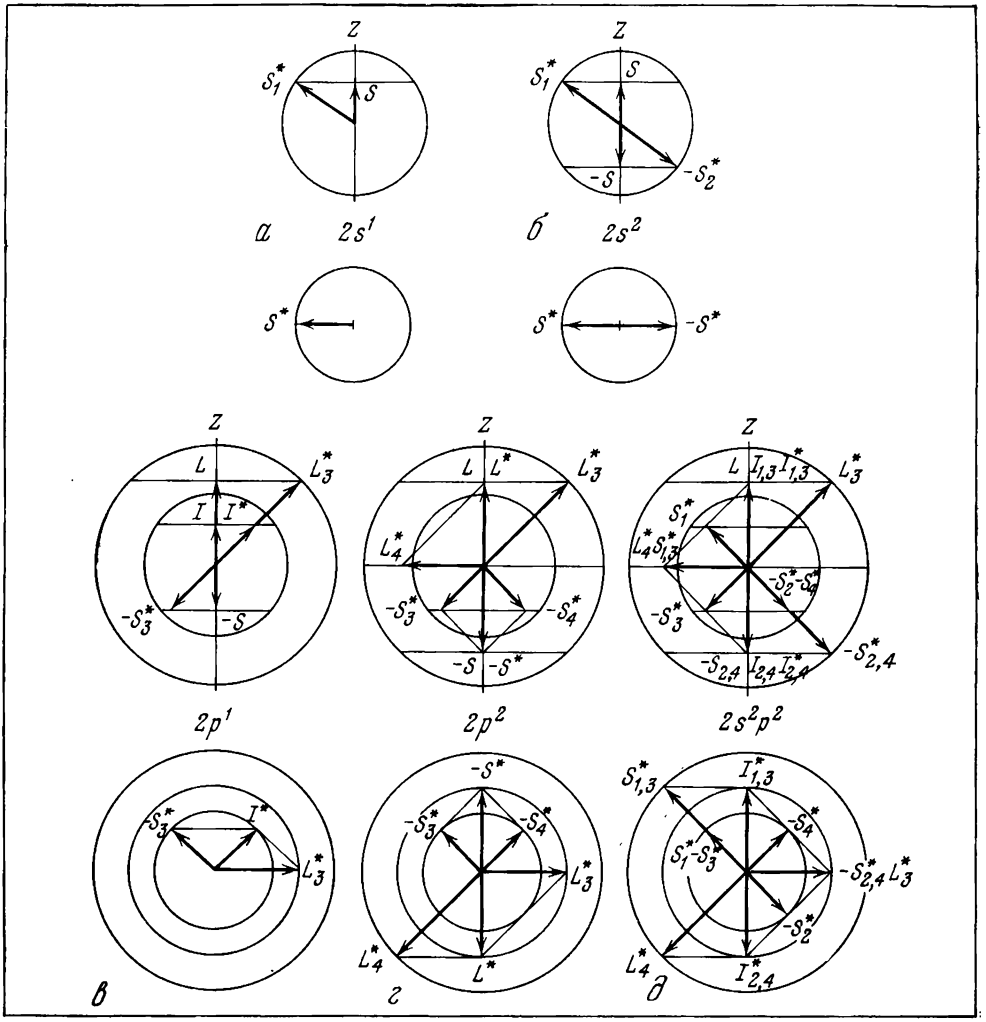


Рис. 3. Пространственное квантование моментов электронов в атоме углерода
а — $2s^1$; *б* — $2s^2$; *в* — $2p^1$; *г* — $2p^2$; *д* — $2s^2p^2$

на координатные плоскости равны $1/\sqrt{2} = 0{,}707$ и направлены под углами 45° к координатным осям.

Орбитальные L^* моменты $2p^2$-электронов лягут в плоскости, нормаль к которой с осью $0Z$ составит угол, равный половине тетраэдрического.

Геометрические суммы орбитальных L^* и спиновых S^* моментов $2p^2$-электронов равны по абсолютной величине ($\sqrt{5/2} = 1{,}22$) и направлены в прямо противоположные стороны (см. рис. 3). Таким образом, суммарный механический и магнитный моменты для атома углерода при спин-орбитальном SL-взаимодействии получаются равными нулю, что и имеет место в действительности. Эти суммарные моменты направлены к оси $0Z$ под углом, котангенс которого составляет $\pm 1/3$.

Спиновые моменты $2s^2$-электронов должны быть направлены под одними и теми же углами как к орбитальным, так и к спиновым моментам обоих $2p^2$-электронов, т. е. перпендикулярно к вектору суммы их орбитальных и спиновых моментов.

При $2s^2p^2$-гибридизации суммарные моменты для каждой пары sp-электронов, равные по абсолютной величине, будут направлены в прямо противоположные стороны. Таким образом, можно считать, что эти моменты идут по осям симметрии двухэлектронных тороидов, возникающих при sp-гибридизации.

При прецессии вокруг оси 0Z вся группа взаимосвязанных орбитальных и спиновых моментов электронов атома углерода целиком вращается вокруг этой оси. Взаимоположения отдельных моментов сохраняются. Сохраняются и все проекции моментов на ось 0Z. Абсолютная величина механических моментов и углы с осью 0Z также остаются постоянными. Но моменты на образующей электронного конуса прецессии могут занимать любое положение. Горизонтальные проекции их на плоскость X0Y непрерывно вращаются. Поэтому их средние значения равны нулю. Эти явления можно рассматривать как проявление принципа неопределенности.

Из изложенного следует, что предлагаемая схема пространственного расположения моментов электронов позволяет находить их относительное взаимное расположение, при котором самосогласуются как величины самих взаимодействующих моментов, так и их суммы и проекции на ось 0Z.

Неопределенность общего поворота всей группы моментов вокруг оси внешнего магнитного поля 0Z остается в силе, как и неопределенность ориентировки этой оси в пространстве при отсутствии внешнего магнитного поля.

В связи с изложенным необходимо отметить следующее.

1. Нужно различать параллельность и антипараллельность самих моментов L^*, S^* и J^* и их проекций L, S и J на ось 0Z. При антипараллельности моментов их проекции на любую ось, в том числе и на ось 0Z, всегда получаются равными нулю. Но антипараллельность проекций каких-либо моментов на ось 0Z необязательно означает антипараллельность других проекций и отсутствие равнодействующего момента, перпендикулярного к этой оси. Угол в плане между такими моментами может отличаться от 180°.

2. Наличие прецессии двух моментов относительно их равнодействующего момента может приводить в среднем к нейтрализации составляющих, перпендикулярных к этой равнодействующей.

3. Для рассмотренного случая атома углерода суммарные механические, а следовательно, и магнитные моменты получились равными нулю и потому надобности в вычислении множителей Ланде не возникло.

Предлагаемый метод сложения орбитальных и спиновых моментов в одном из трех подпространств может быть применен и для других многоэлектронных атомов. Более подробные данные по механическим и магнитным моментам можно найти в многочисленной литературе [1, 2, 4—9 и др.]

Литература

1. *М. А. Ельяшевич.* Атомная и молекулярная спектроскопия. М., Физматгиз, 1962.
2. *Э. В. Шпольский.* Атомная физика. М.— Л., Гостехтеориздат, т. II, 1951: т. I, 1963.
3. *М. М. Протодьяконов.* Свойства и электронное строение породообразующих минералов. М., «Наука», 1969.

4. *Я. Д. Дорфман.* Магнитные свойства и строение вещества. М., Гостехтсориздат, 1955.
5. *А. Зоммерфельд.* Строение атома и спектры. М., Гостехиздат., 1956.
6. *Е. Кондон, Г. Шортли.* Теория атомных спектров. ИЛ. 1949.
7. *Д. Гуденаф.* Магнетизм и химическая связь. М., «Металлургия», 1968.
8. *С. В. Вонсовский.* Магнетизм микрочастиц. М., «Наука», 1973.
9. *J. S. Smart.* Effective field theories of magnetism. Philadelphia — London. W. B. Saunders Co., 1966.

Глава 3

ФОРМЫ ЭЛЕКТРОННЫХ ОБОЛОЧЕК АТОМОВ

Электронные оболочки атомов I и II периодов таблицы Менделеева

Помимо описанных методов исследования строения электронных оболочек атомов, основанных на анализе эмпирических данных о потенциалах ионизации, квантовомеханических расчетах гибридизированных оболочек и пространственного квантования механических и магнитных моментов многоэлектронных атомов весьма много полезной информации можно извлечь из геометрической интерпретации теории групп или из законов симметрии [1, 2, 3].

Мы считаем, что электронные оболочки атомов следует рассматривать как результат их образования при последовательном, а не одновременном захвате ядром атома или положительным ионом электронов из окружающей плазмы. Согласно ТФП, многие явления происходят в дополнительных втором и третьем подпространствах. Однако описание некоторых свойств электрона в одном первом подпространстве правомерно. Электронное облако рассматривается как совокупность большого числа электронных витков.

Авторы отказываются от представлений о сферической симметрии всех многоэлектронных атомов и от нулевого приближения, т. е. от пренебрежения взаимодействием электронов, которое фактически имеет тот же порядок величин, что и взаимодействие каждого из электронов с ядром атома.

Мы учитываем принцип минимальной экранировки (принцип наименьшей помехи), согласно которому электроны, отталкиваясь, стремятся расположиться в пространстве как можно дальше один от другого, что неизбежно приводит к симметричным конфигурациям. Последние захваченные электроны заполняют промежутки между ранее захваченными, т. е. располагаются в местах наименьшей экранировки вдоль осей симметрии. Определяющими считаются электрические, а не магнитные взаимодействия.

Рассмотрим образование атомов и ионов из плазмы, т. е. из движущихся в пространстве независимых ядер и электронов. При их сближении в зависимости от величин относительных скоростей и расстояний могут произойти три варианта явлений: а) при больших скоростях электрон обогнет ядро по гиперболе или параболе и улетит; б) при средних скоростях он начнет вращаться вокруг ядра; в) при малых — падет на ядро и произойдет его захват и превращение ядра в другое. В первом и последнем случаях атома не образуется.

Вероятность одновременного захвата ядром двух или более электронов весьма невелика, и потому мы можем рассматривать поочередный захват электронов, который может продолжаться до тех пор, пока экранирующий заряд электронов не сравняется с зарядом ядра, после чего дальнейшее наращивание электронной оболочки прекратится.

Начнем с образования одноэлектронных водородоподобных ионов. При случайном сближении в пространстве ядро и электрон начнут вследствие взаимного притяжения двигаться вокруг общего центра масс, который может иметь поступательное движение в пространстве, не влияющее на образование атома.

При перемещении электрона из бесконечности, где его потенциальная энергия относительно данного ядра максимальна, силы притяжения будут производить работу. Когда электрон окажется на первой боровской орбите, часть этой работы превратится в кинетическую энергию, а оставшаяся энергия будет излучена в пространство. Дефицит энергии и обеспечивает устойчивость атома. Чтобы разрушить электронную оболочку, необходимо получить энергию из внешних источников.

Так как масса ядра водорода в 1836,1 раза превышает массу электрона, то центр массы иона или атома будет очень близок к центру ядра.

Как известно, теория Бора — Зоммерфельда позволила правильно вычислить энергию электрона, радиусы его орбит и частоты излучения для атома водорода. Те же величины фигурируют и в современной квантовой теории, основанной на решении уравнения Шредингера.

Однако между этими двумя подходами есть и существенная разница. По теории Бора, электрон на первой боровской орбите имеет орбитальный момент $\hbar$. В то же время орбитальный момент для электрона в s-состоянии в современной квантовой теории принимается равным нулю.

Эту разницу можно объяснить двояко: а) электрон не вращается вокруг ядра или совершает только радиальные колебания все время в различных направлениях (только тогда получается сферически-симметричная электронная оболочка для s-электрона), б) орбитальный момент электрона нейтрализуется за счет усреднения при прецессии и нутации.

Первое объяснение для точечного электрона и ядра не годится. При радиальных колебаниях он должен каждый раз сталкиваться с ядром, но без захвата. Однако если учесть, что электрон во втором подпространстве (см. раздел I) представляет собой два токовых кольца, радиусы которых на два порядка больше соответствующих радиусов для ядра, то можно представить, что электрон проходит не сквозь ядро, а, наоборот, ядро проходит сквозь электрон. Поэтому гипотеза о радиальных колебаниях электрона в атоме не исключается. Однако вероятность того, что при образовании каждого атома водорода или водородоподобного иона сближение ядра и электрона всегда происходило только по прямой линии, чрезвычайно мала. При нецентральном же сближении электрона с ядром всегда будет возникать некоторый орбитальный момент. Поэтому нам представляется более правдоподобным второе объяснение отсутствия у s-электрона орбитального момента.

При такой точке зрения мгновенный орбитальный момент электрона равняется единице (в $\hbar$). Однако электрон в атоме совершает не только орбитальное движение, но и нутирует и прецессирует.

Известно, что тела вращения — шар, диск, тороид — при попытке повернуть их ось вращения в поперечном направлении — проявляют прецессию

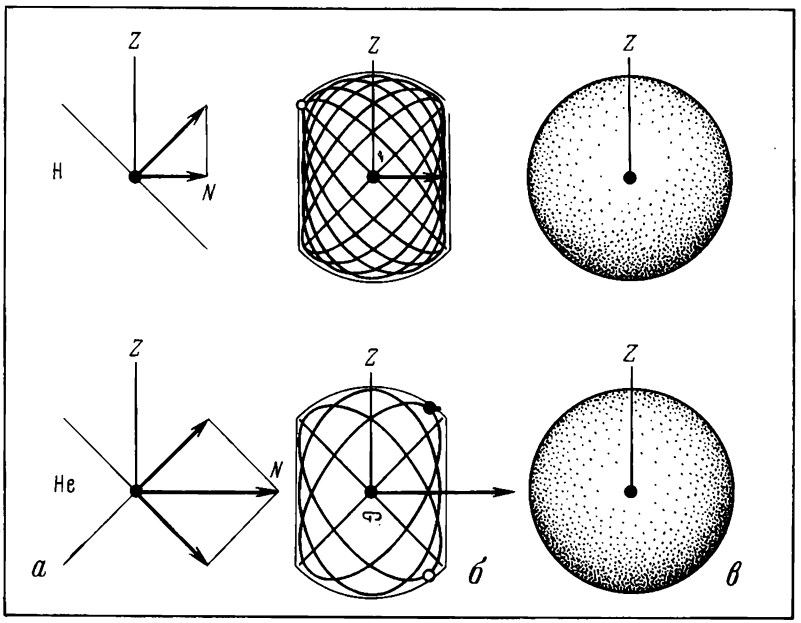


Рис. 1. Примерная схема движения электрона в оболочке водорода и гелия

а — мгновенное положение одного витка; *б* — влияние нутации на орбиту; *в* — влияние прецессии на орбиту

(энергия на нее не расходуется). Нутация возникает только при наличии асимметрии вращающейся системы. Но одиночный электрон в поле ядра как раз и обладает такой асимметрией (центры массы системы и полярного момента инерции не совпадают). Поэтому следует ожидать, что взаимодействие двух орбитальных и двух спиновых моментов ядра и электрона относительно общего центра масс для водородоподобных ионов должно вызвать не только прецессию, но и нутацию. В то же время сам электрон, обладающий осевой симметрией, будет только прецессировать. Обычно угловая скорость орбитального движения является самой большой, меньше будет скорость нутации, а самой маленькой — скорость прецессии.

Если момент направлен по оси нутации и равен единице, то вектор орбитального момента направлен к нему под углом 45° и численно равен $\sqrt{2}$. Перпендикулярная к этой оси составляющая момента вследствие усреднения во времени при нутации эквивалентна нулю.

Самый большой из возможных углов прецессии равен 90°. Надо полагать, что ось нутации будет расположена перпендикулярно к оси прецессии $0Z$. Тогда проекция орбитального момента на эту ось окажется равной нулю, что соответствует как квантовомеханическим представлениям, так и замеренным величинам орбитального момента водорода и водородоподобных атомов и ионов.

Если считать, что за время одного оборота вокруг ядра электрон движется по кругу с радиусом первой боровской орбиты (рис. 1, *а*), то при нутации механический момент опишет вокруг этой оси конус с углом при вершине 90°, а «траектория» электрона из плоской превратится в пространственную,

все витки которой лягут в пределах шарового пояса с центральным углом 90° (рис. 1, *б*). В результате прецессии этот пояс будет вращаться целиком вокруг оси $0Z$ (рис. 1, *в*). При этом каждый новый виток «траектории» электрона будет ориентирован в пространстве по-новому, но все они расположатся на поверхности сферы боровского радиуса. Из-за того, что отношение мгновенного механического и магнитного моментов является иррациональным числом, ни один из витков траектории электрона на сфере никогда не будет повторяться, т. е. вероятность появления электрона в любой точке сферы будет одна и та же. Это дает сферическую симметрию за большой промежуток времени.

Если бы мы попытались ограничиться рассмотрением только одной прецессии вокруг оси $0Z$, то тоже получили бы в среднем нулевой орбитальный момент. Однако при этом все траектории электрона пересекались бы на его полюсах, и потому вероятность встретить там электрон была бы во много раз больше, чем на экваторе; следовательно, сферической симметрией такая система не обладала бы.

Если учесть описанную резкую анизотропию поля ядра во втором подпространстве, то получится, что в разных местах сферы на электрон будет действовать резко различная радиальная сила притяжения его к ядру. Это приведет к радиальной пульсации боровской сферы. Таким образом, траектория электрона получится чрезвычайно сложной. Каждый ее виток по-новому расположен в пространстве и имеет различный радиальный размер. Боровский радиус орбиты является только средним, наиболее часто встречающимся радиусом.

Таким образом, электронное облако мы представляем как совокупность весьма большого числа витков сложной траектории электрона. прерываемой флуктуациями вакуума. Плотность отдельных частей этого облака будет соответствовать числу отрезков витков траектории электрона в данном элементе пространства за большой промежуток времени. Следовательно, мы рассматриваем частость появления электрона в каждой точке пространства вокруг ядра, которая в пределе стремится к вероятности его обнаружения.

Напомним, что, несмотря на правомерность описания траекторий электрона в одном из подпространств, полное описание всех физических характеристик электрона посредством такой модели принципиально невозможно, часть их описывается в дополнительных подпространствах. В этом смысле и следует понимать границы применения анализируемой здесь модели.

Мгновенный момент количества движения электрона по орбите непрерывно меняет свое положение в пространстве под влиянием прецессии и нутации, и в среднем его проекция на любое направление равна нулю. Это объяснение нулевого значения орбитального момента электрона в *s*-состоянии более логично, чем истолкование, согласно которому электрон движется только по радиусам атома, но в разных направлениях.

Рассмотрим теперь образование двухэлектронного гелийобразного иона. Он возникает, если вблизи от водородоподобного иона окажется второй свободный электрон. Если бы электроны не взаимодействовали, то каждый из них образовал бы вокруг ядра в среднем сферически-симметричную водородоподобную оболочку. При этом мгновенные плоскости вращения отдельных витков траекторий двух электронов были бы случайно ориентированы одна относительно другой.

Но фактически электроны отталкиваются друг от друга. При любом взаимном положении электронов, находящихся на одном и том же расстоя-

нии от ядра, силы кулоновского взаимного отталкивания будут давать как радиальную, так и тангенциальную составляющую. Радиальная будет пропорциональна величине $1/\sin\alpha$, а тангенциальная — $\cos\alpha/\sin^2\alpha$. Потенциальная энергия отталкивания одного электрона от другого пропорциональна $1/\sin\alpha$, где α — половина центрального угла, под которым электроны видны из ядра. Очевидно, что минимального значения все эти величины достигнут при $\alpha = 90°$, когда электроны расположатся по концам одного диаметра, т. е. симметрично.

Радиальная составляющая стремится увеличить средний радиус электронной оболочки, а тангенциальная — сместить электроны в два противоположных полюса сферы. Но как раз в этих точках тангенциальная составляющая превращается в нуль. Электроны по инерции будут пролетать это положение подобно тому, как обычный маятник пролетает при своих колебаниях нижнюю точку, где его потенциальная энергия минимальна.

Полагаем, как и в атоме водорода, что мгновенные механические орбитальные моменты электронов, равные $\sqrt{2}$ и составляющие с осью нутации угол 45°, дают проекцию на нее, равную 2, а перпендикулярная к этой оси проекция вследствие вращения при усреднении дает нуль. Ось нутации будет перпендикулярна к оси прецессии $0Z$, и потому проекция орбитальных моментов на нее также получится равной нулю, что соответствует опытным данным.

Во время прецессии ось нутации вращается вокруг оси $0Z$ в перпендикулярной к ней плоскости, и потому в среднем механический и магнитный орбитальные моменты для гелия также будут равны нулю.

Аналогично атому водорода все мгновенные круговые орбиты атома гелия вследствие нутации располагаются в пределах шарового пояса вокруг оси нутации. При прецессии вокруг оси $0Z$ этот пояс дает равномерное распределение витков орбит по поверхности шара. Наличие резкой анизотропии поля ядра во втором подпространстве приведет к сильной радиальной пульсации сферической оболочки. Все это за длительное время даст сферическую симметрию электронного облака для атома гелия.

Как известно, в кристаллографии успешно используется модель кристаллической решетки, «упакованной» из шарообразных атомов. За атомный радиус обычно принимается половина расстояния между центрами ближайших атомов. Мы используем аналогичную модель для «упаковки» электронных облаков вокруг ядра. За радиус электронного облака будем принимать половину расстояния между центрами ближайших электронных облаков одной и той же электронной оболочки. Однако эта аналогия будет неполной. Атомы в кристаллической решетке могут только колебаться относительно некоторых равновесных положений. Электронные же облака в атоме могут, кроме того, вращаться вокруг ядра и относительно друг друга.

Следует полагать, что при удержании ядром, имеющим любой заряд Z, одного и того же числа электронов N будут получаться подобные по форме, но различные по размерам электронные облака. Так, все одноэлектронные оболочки, т. е. оболочки водорода, иона гелия, двойного иона лития, тройного иона бериллия и т. д., будут водородоподобными. Все двухэлектронные оболочки (атома гелия, иона лития, двойного иона беррилия, тройного иона бора и т. д.) будут гелийподобными. Аналогично все десятиэлектронные оболочки получаются неоноподобными и т. д.

Чем больше будет заряд ядра, тем ближе к нему расположатся электроны и тем меньше получится размер изоэлектронной оболочки. Наоборот, при

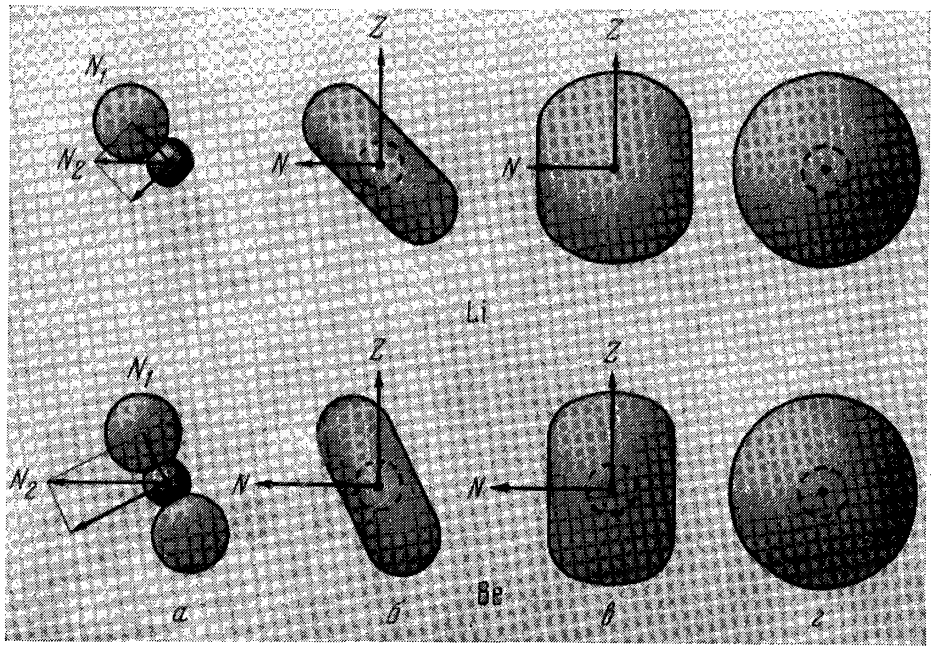
постоянном заряде ядра присоединение каждого нового электрона вследствие их взаимного отталкивания будет приводить к увеличению расстояний между электронами и ядром. Поэтому, например, одноэлектронный ион гелия будет иметь меньший размер, чем одноэлектронный нейтральный атом водорода или двухэлектронный атом гелия. Если же водородоподобный ион захватит еще один электрон, то размер иона увеличится.

Рассмотрим теперь захват двухэлектронным гелийобразным ионом третьего электрона при образовании атома Li и литийобразных ионов. Очевидно, что минимум экранировки или минимум потенциальной энергии взаимного отталкивания от двух электронов всегда будет находиться на плоскости симметрии, перпендикулярной к линии, соединяющей мгновенные положения электронов. Но при их движении плоскость будет непрерывно вращаться в пространстве вокруг оси нутации с угловой скоростью этой нутации. Поэтому третий электрон будет стремиться на эту ось. Ядро атома будет меньше всего экранировано двумя электронами гелийобразной оболочки вдоль той же оси. Поэтому третий электрон будет «затянут» в потенциальную яму или в углубление в центре тороида, образованного двумя электронами $1s^2$-гелийобразной оболочки при их вращении. Мгновенная упаковочная схема для такого трехэлектронного атома или иона показана на рис. 2, *а* сверху.

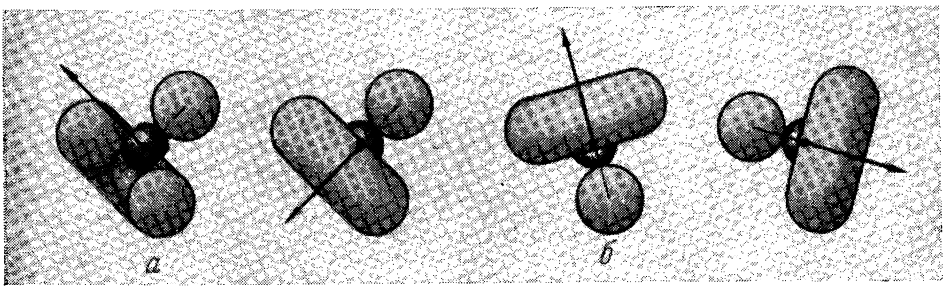
Приведенные расчеты и примеры показывают, что для литийобразных ионов экранирующий заряд заметно меньше $3 - 1 = 2$. Это значит, что отталкивание от двух экранирующих электронов будет недостаточно для предотвращения падения третьего электрона на ядро вдоль оси нутации даже

Рис. 2. Схемы электронных оболочек атомов лития и бериллия

а — упаковочная схема; *б* — тороиды внешних электронов; *в* — влияние нутации; *г* — влияние прецессии



для нейтрального атома лития, не говоря уже о положительных литийобразных ионах. Так как такие атомы и ионы реально существуют в природе, следовательно, третий и последующие электроны предохраняются от падения на ядро действием центробежной силы. Это будет в том случае, если третий электрон, оставаясь все время против оси нутации, станет вращаться вокруг ядра с угловой скоростью орбитального движения, равной угловой скорости прецессии первых двух электронов $1s^2$-оболочки. Но тогда возникнет орбитальный момент третьего электрона, перпендикулярный к мгновенному положению оси нутации. Произойдет сложение составляющей орбитального момента первых двух электронов вдоль оси нутации с перпендикулярным



к ней орбитальным моментом третьего электрона (рис. 2, *б*). В результате возникнет новое направление оси нутации уже для трех электронов. Новая ось нутации будет перпендикулярна к оси прецессии и потому не даст проекции на нее. При этом средний орбитальный момент такого атома или иона окажется равным нулю, что соответствует экспериментам.

Мгновенная угловая скорость орбитального движения третьего $2s^1$-электрона, повторяющего движения прецессии первых двух электронов, меньше угловой скорости этих электронов, и потому расстояние от третьего электрона до ядра получится больше расстояния от ядра до первых двух $1s^2$-электронов. Следовательно, третий электрон по своему движению будет неэквивалентен первым двум — он начнет построение новой, второй электронной оболочки. При своем мгновенном орбитальном движении третий электрон образует тороид увеличенного размера, охватывающий внутреннюю оболочку наподобие кольца Сатурна (рис. 2, *б*). Вследствие нутации тороид расплывается в бочкообразную фигуру (рис. 2, *в*), которая в свою очередь при прецессии станет статистически сферически-симметричной (рис. 2, *г*).

Начало образования второй электронной оболочки совпадает с началом второго периода таблицы Менделеева. В первой электронной оболочке имеется два изоэлектронных ряда, т. е. каждый ион содержит по два электрона. Начало же образования второй электронной оболочки соответствует третьему изоэлектронному ряду (включающему атом лития, ион бериллия, двойной ион бора и т. д.), который характеризуется иным наклоном асимптот, чем предыдущие два ряда.

Рассуждая аналогичным образом, найдем, что четвертый электрон будет, вероятнее всего, притянут по линии наименьшей экранировки вдоль мгновенной оси вращения первого тороида, но с противоположной стороны от третьего электрона, т. е. как можно дальше от него. Мгновенная упаковочная схема для этого случая изображена на рис. 2, *а* снизу.

В результате орбитального движения третий и четвертый $2s^2$-электроны, оставаясь все время против центров внутреннего тороида из $1s^2$-электронов при его прецессии, охватят внутренний тороид наружным большего диаметра подобно литийобразным ионам. Однако поскольку орбитальный момент для двух электронов удвоится, углы между этим моментом и осью нутации изменятся (рис. 2, *б*). Вследствие нутации вокруг новой оси этот тороид также примет бочкообразную форму (рис. 2, *в*), а под действием прецессии — размажется в полый шар (рис. 2, *г*).

Такова будет форма электронной оболочки для $2s^2$-электронов. Аналогично трехэлектронной оболочке средний магнитный момент орбитального

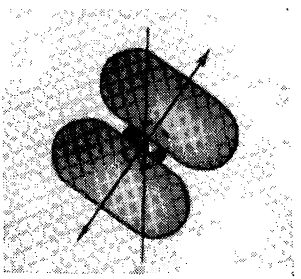


Рис. 3. Схема электронной оболочки атома бора
а — мгновенная упаковочная схема;
б — тороид и неспаренный электрон

Рис. 4. Схема электронной оболочки углерода

движения для нее будет равен нулю, что и наблюдается в действительности. Величина экранирующего заряда, определенная расчетом, равнялась 2,177 при опытном ее значении 2,199, т. е. отличалась всего на 1%.

Пока во второй оболочке будут находиться только $2s^2$-электроны, она будет статистически сферически-симметричной.

На разобранных схемах указаны границы каждого электронного облака. Конечно, они условны и только приблизительно характеризуют формы поверхностей изоэкранирования или изопотенциальных поверхностей взаимного отталкивания электронов. На самом деле границы электронных облаков размыты.

При захвате ионом пятого (третьего наружного) электрона он, вероятнее всего, будет затянут вдоль мгновенной оси вращения внешнего тороида из $2s^2$-электронов в одно из центральных его углублений и несколько сместит внешний тороид с мгновенной оси вращения внутреннего $1s^2$-тороида (рис. 3, *а*). В результате этого третий и четвертый электроны уже не смогут следовать за всеми смещениями оси внутреннего тороида. Поэтому в дальнейшем мы сможем рассматривать внутреннюю гелийобразную оболочку просто как статистически сферически-симметричную и потерявшую способность непрерывно направлять траектории внешних электронов.

Каждый из трех внешних электронов, отталкиваясь один от другого, будет стремиться в места минимальной экранировки от двух своих соседей. Это условие выполнимо одновременно для всех трех электронов только в том случае, если они разместятся по углам равностороннего треугольника, центр которого совпадает с центром ядра атома.

Как было показано, рассчитанный для такой конфигурации экранирующий заряд получился равным 3,155, что на 0,3% отличалось от его опытного значения.

Усреднение проекций орбитальных моментов $2s^2$-электронов при их прецессии и нутации приводит к тому, что суммарный орбитальный магнит-

ный момент для них получается равным нулю и остается только момент от неспаренного $2p^1$-электрона. Такой будет форма электронной оболочки у атома бора и подобных ему иона углерода, двойного иона азота и т. д.

В момент захвата шестого (четвертого наружного) электрона он, вероятнее всего, образует пару (тороид) с ранее не спаренным электроном борообразного иона, так как с этой стороны экранирующий зарад будет меньше, чем со стороны двухэлектронного тороида. Но если один из тороидов будет состоять из $2s^2$-, а второй — из $2p^2$-электронов, то они будут неэквивалентны. Эквивалентность может быть достигнута, только если каждый из тороидов будет состоять из $2sp$-гибридизированных электронов.

При квантовомеханическом анализе строения электронных облаков для $2sp$-гибридизации мы нашли, что форма облаков вероятности как раз имеет вид двух соосных тороидов и характеризуется наличием двух равных и противоположно направленных моментов. Таким образом, все три различных подхода приводят нас к одной и той же форме электронного облака атома углерода и углеродообразных ионов в виде двух параллельных двухэлектронных тороидов с противоположно направленными моментами.

За каждый полный оборот оба электрона будут четыре раза образовывать с другой парой тетраэдр и четыре раза располагаться по углам квадрата. В первом случае экранирующий заряд получится равным 3,837, а во втором $2 + \sqrt{2} + 1/2 = 3{,}914$. Значение экранирующего заряда из эмпирического уравнения потенциалов ионизации для углеродообразного изоэлектронного ряда будет равным 3,835. Таким образом, наиболее близким к опытному является тетраэдрическое мгновенное расположение электронов.

Описанная электронная оболочка атома углерода, иона азота, двойного иона кислорода, которая прецессирует вокруг вертикальной оси (рис. 4), отличается от электронного облака плотности вероятности при sp-гибридизации только своим наклоном, но не формой.

При захвате седьмого (пятого наружного) электрона он будет стремиться занять место против центра грани одного из мгновенных тетраэдров, образованных предыдущими четырьмя электронами, т. е. в области минимальной экранировки. При этом тетраэдр сместится вбок, образуя вместе с пятым наружным электроном треугольную дипирамиду. Три электрона образуют общее основание этой дипирамиды, а два расположатся в ее вершинах. Подсчитанный для такой фигуры экранирующий заряд равен 4,522, т. е. отличается от эмпирического (4,509) всего на 0,3%.

Но так как ранее захваченные четыре внешних электрона продолжают вращаться в противоположные стороны, эта фигура будет периодически разрушаться и возникать вновь. Форма электронной оболочки примет вид уже не параллельных, как у углерода, а наклоненных под углом двух тороидов, раздвинутых с одной стороны неспаренным электроном (рис. 5, *а*).

Как было показано, сумма трех орбитальных моментов для $2p^3$- и для $2s^2$-электронов равна нулю. Магнитный момент будет создаваться только за счет трех неспаренных спиновых моментов $2p^3$-электронов. Эта оболочка представляет собой пример более сложной гибридизации, когда две тороидальные орбитали будут отличаться от одной орбитали неспаренного электрона.

При захвате восьмого (шестого наружного) электрона он, вероятнее всего, будет притянут к ядру в направлении наименьшей экранировки со стороны неспаренного седьмого электрона и образует вместе с ним третью наружную пару (тороид). Все шесть наружных электронов будут стремиться располо-

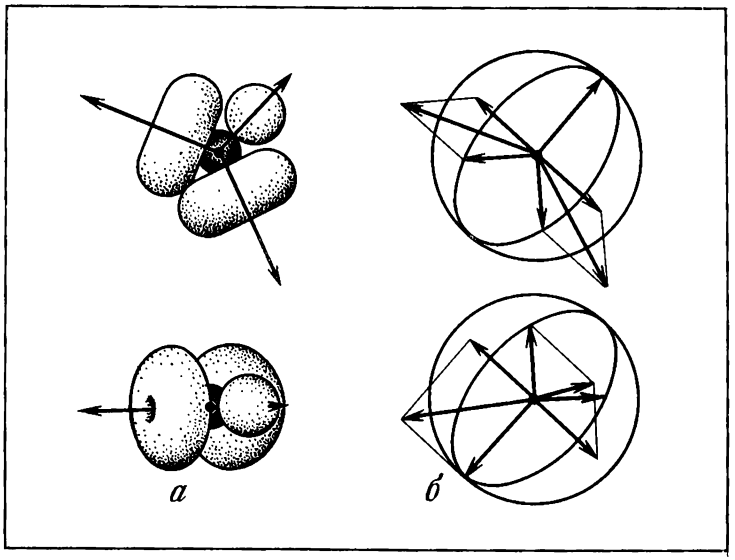


Рис. 5. Схема электронной оболочки азота

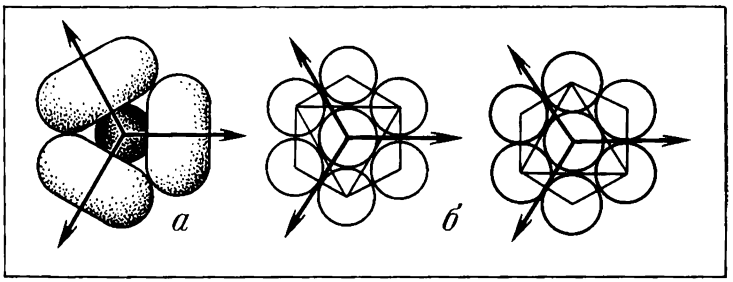


Рис. 6. Схема электронной оболочки кислорода

житься как можно дальше один от другого, т. е. по углам октаэдра, когда экранирующий заряд для каждого электрона примет минимальное значение, равное 5,328, что всего на 0,3% отличается от его опытной величины (5,345). Три пары наружных $2s^2p^4$-электронов при гибридизации образуют три тороида, мгновенные оси вращения которых располагаются в одной плоскости под углом 120° одна к другой (рис. 6, *а*).

При исследовании гибридизации методами квантовой механики мы установили, что электронные облака вероятности имеют в этом случае вид трех тороидов, оси симметрии которых располагаются в одной и той же плоскости под углами 120° одна к другой. Таким образом, и в этом случае схема электронной оболочки для кислородообразных ионов, полученная нами по методу минимальной экранировки и методом квантового расчета гибридизированных оболочек, получилась практически одинаковой.

За один оборот каждая электронная пара будет четыре раза образовывать с двумя другими парами октаэдр, по-разному ориентированный в простран-

стве (рис. 6, *б*). Кроме того, все три тороида будут совершать нутацию и прецессию. Такова будет форма электронной оболочки кислорода, иона фтора, двойного иона неона и т. д.

Для мгновенной октаэдрической формы кислородообразной оболочки минимальная экранировка ядра будет отмечаться вдоль тройных осей симметрии октаэдра, проходящих через центры его треугольных граней — перпендикулярно к ним. Именно в этом направлении, вероятнее всего, и будет затянут девятый (седьмой наружный) электрон. При этом он несколько раздвинет ближайшие к нему три электрона на грани октаэдра, а те в свою очередь сдвинут ближе один к другому три других электрона на противоположной грани октаэдра, как это показано на рис. 7, *а*.

Рассматривая не статическую, а динамическую картину, заметим, что в кислородообразном ионе ядро и первая $1s^2$-оболочка будут с трех сторон экранированы тремя тороидами и обнажены в промежутках между тороидами вдоль мгновенной тройной оси симметрии, перпендикулярной к трем двойным мгновенным осям вращения тороидов $2sp^2$-гибридизированной оболочки. Поэтому следующий электрон, вероятнее всего, будет затянут в один из этих промежутков. При этом мгновенные оси вращения ранее образованных тороидов будут отклонены из общей плоскости в сторону от вновь захваченного электрона (рис. 7, *б*). В результате получится форма электронной оболочки атома фтора и аналогичных ему иона неона, двойного иона натрия и т. д.

При захвате десятого (восьмого наружного) электрона он, вероятно, будет затянут в одно из слабо экранированных углублений между неспаренным девятым электроном и двумя смежными с ним тороидами. При этом возникнет четвертый тороид, который еще несколько наклонит оси вращения предыдущих трех тороидов и вместе с ними расположится наиболее симметрично по граням тетраэдра, образуя торотетраэдрическую оболочку атома неона или аналогичных ему иона натрия, двойного иона магния и т. д. Эта оболочка (рис. 8, *а*) изображена со стороны двойной и тройной осей симметрии и нормали к плоскости симметрии. Оси вращения тороидов будут направлены вдоль четырех тройных осей симметрии тетраэдра, составляющих одна с другой тетраэдрические углы 109°28′.

Сравнивая полученную форму электронной оболочки неона с формой электронного облака при sp^3-гибридизации, заметим, что они практически идентичны.

Если считать псевдовекторы орбитальных моментов каждой пары электронов, образующих тороид, направленными вдоль общей их оси вращения, то сумма четырех таких векторов, направленных под тетраэдрическими углами один к другому, даст нуль; сумма моментов количества движения и их проекций на ось $0Z$, даваемая квантовой механикой для $2s^2p^6$-оболочки также равна нулю. Таким образом, наблюдается совпадение симметрии электронного облака и магнитных моментов рассмотренной формы гибридизированной sp^3-оболочки с формой, даваемой квантовой механикой.

При вычислении величин экранирующих зарядов мы указывали, что мгновенное расположение электронов в момент максимального их удаления один от другого или при минимальной взаимной экранировке будет по углам куба. На рис. 8, *б* показано, что четыре пары электронов, вращаясь вокруг четырех расположенных под тетраэдрическими углами тройных осей симметрии, за один оборот шесть раз займут положения по углам куба. При этом возникающие кубы будут ориентированы в пространстве по трем различным

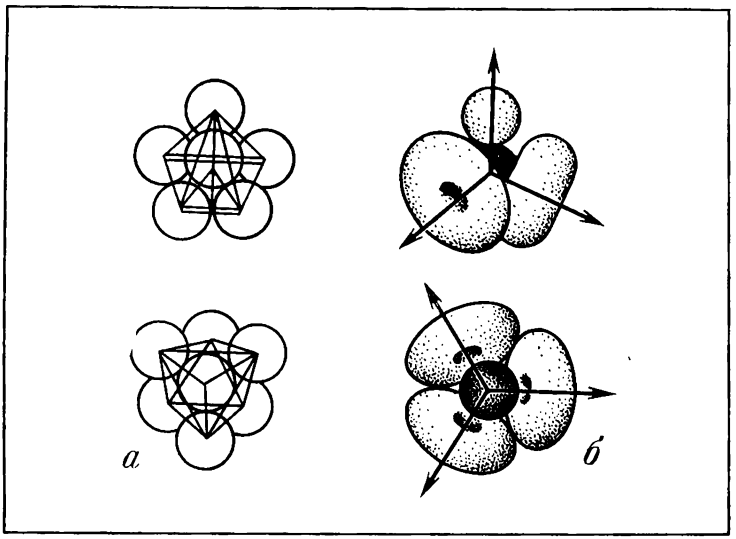


Рис. 7. Схема электронной оболочки атома фтора

а — мгновенная упаковочная схема; *б* — три тороида и неспаренный электрон

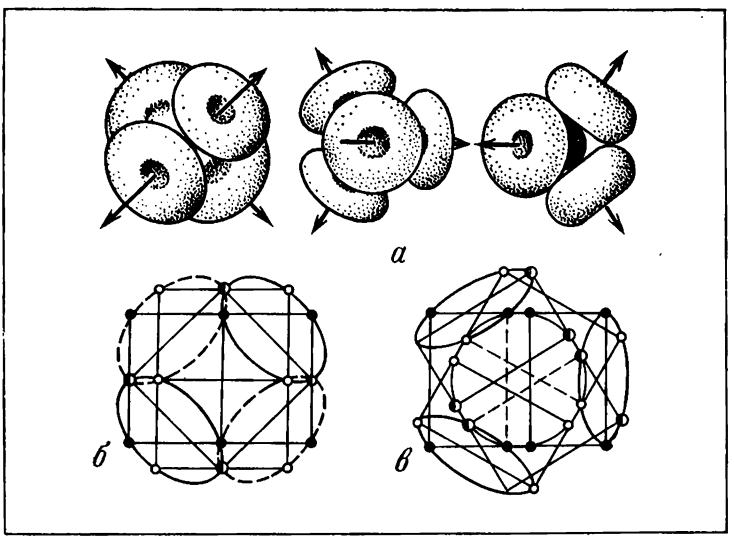


Рис. 8. Схема электронной оболочки атома неона

а — вид вдоль двойной оси, тройной оси и плоскости симметрии; *б* — вдоль двойной оси; *в* — вдоль тройной оси

взаимно перпендикулярным направлениям. При вращении электронов в тороидах непрерывного поворота одного и того же куба в пространстве не произойдет, а возникающий куб будет деформироваться, чтобы затем превратиться в иначе ориентированный куб. Разные положения кубов отмечены различными условными обозначениями.

При взгляде на торотетраэдр вдоль его двойной оси симметрии (рис. 8, *б*) кубы, отмеченные белыми и черными кружками, будут поставлены относительно плоскости чертежа на ребро в двух взаимно перпендикулярных направлениях, а третий куб двумя своими гранями будет ориентирован параллельно плоскости чертежа.

Тот же торотетраэдр (рис. 8, *в*) расположен в пространстве таким образом, что одна из его тройных осей симметрии перпендикулярна к плоскости чертежа. При этом каждый из трех кубов будет размещен так, что одна из плоскостей симметрии, перпендикулярная к его ребрам, окажется перпендикулярной к плоскости чертежа. Эти плоскости в плане будут составлять одна с другой угол 120°. Четыре ребра каждого из кубов, перпендикулярные к упомянутым плоскостям симметрии, расположатся параллельно плоскости чертежа.

Траектории каждой пары электронов на рис. 8, *б* и *в* изображены в виде эллипсов и кругов. На рис. 8, *б* все они расположены наклонно, так, как это видно на левой схеме рис. 8, *а*. На рис. 8, *в*, соответствующем средней схеме рис. 8, *а*, один центральный круг расположен сверху параллельно плоскости чертежа, а три других — наклонены наружу. Они выглядят как узкие эллипсы.

Как видно на этом рисунке, три ребра трех кубов, соединяющие попарно мгновенные положения электронов, лежат в одной плоскости, но пересекаются между собой не в одной, а в трех точках. Вследствие этого шесть положений электронов на круговой орбите расположены не равномерно, а попарно: то на малых, то на больших расстояниях один от другого. Это значит, что электроны двигаются по круговым орбитам периодически — то медленно, то быстро. Когда электроны двух тороидов движутся так, что все время остаются антиподами, движение их замедляется, когда же двум положениям электрона одного тороида соответствуют антиподы разных тороидов, скорость этого электрона увеличивается.

Представление о круговой траектории электронов в тороидах — упрощение первого приближения. Можно ожидать, что эта средняя траектория является не плоской, а пространственной. Там, где электрон приближается к ядру, его скорость возрастает, а при удалении от ядра — уменьшается. Тогда вместо круга траектория примет вид звезды с округлыми углами. Три относительно узких угла будут выступать наружу относительно сферы, на которой расположены все четыре круговые орбиты, а три более широких угла — западать внутрь. Такая форма орбиты может помочь понять неравномерность движения электронов за время одного оборота в тороиде. Она может быть также объяснена тем, что при переходе от одной кубической конфигурации к другой расстояния между электронами изменяются, а следовательно, меняется и мгновенное значение экранирующего заряда. Электроны то приближаются к своим ближайшим соседям (тормозятся), то удаляются от них (ускоряются).

Для дальнейших построений нам будет достаточно этого первого грубого приближения, согласно которому каждый тороид принимается за тело вращения. Описанная траектория является средней. Вследствие сильной анизотропии полей ядра и электронов во втором подпространстве действующие на них силы все время меняются, и потому электроны отклоняются от описанных средних траекторий, что, наряду с квантовыми флуктуациями, определяет вероятностный характер электронных облаков — тороидов.

Рассчитанные величины экранирующих зарядов для мгновенного расположения электронов по углам кубов равнялись 6,935, т. е. всего на 2,5% отличались от экспериментального значения (6,760).

Таким образом, согласно нашим представлениям, электронные оболочки неона, иона натрия, двойного иона магния и других элементов являются не сферически-симметричными, как оболочка гелия, а тетраэдрически-симметричными. Они относятся к кубической сингонии — к планальному гексатетраэдрическому виду симметрии. Основными элементами симметрии у них являются три взаимно перпендикулярные четверные зеркально-поворотные оси (они же двойные оси симметрии L_4^2), четыре тройные оси симметрии L^3, расположенные под тетраэдрическими углами одна к другой, и шесть плоскостей симметрии P, пересекающихся под углами 90 и 120°. Центр инверсии отсутствует. Обозначение элементов симметрии такой фигуры, согласно правилам кристаллографии, $3L_4^34L6P$ (рис. 9). Строго говоря, для описания симметрии торотетраэдрических электронных оболочек атомов следует пользоваться не федоровскими точечными группами, а шубниковскими группами симметрии [4].

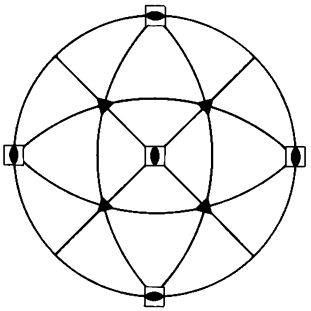
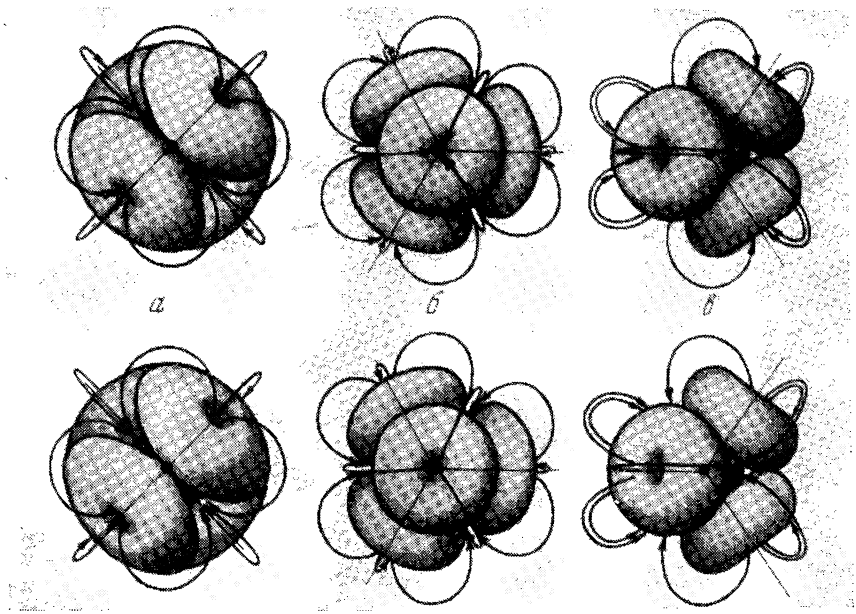


Рис. 9. Элементы симметрии электронной оболочки неона

Рис. 10. Формы магнитных силовых линий неонообразной электронной оболочки

а — по оси L^2; *б* — по оси L^3; *в* — по плоскости симметрии P



Каждый тороид будет эквивалентен кольцевому току, который создает магнитное поле, симметричное относительно оси вращения тороида. Приводим схему магнитных силовых линий неонообразной электронной оболочки (рис. 10) в различных ракурсах.

Надо полагать, что равновозможны два типа магнетизма таких оболочек в зависимости от направления вращения электронов в тороидах по часовой стрелке или против нее, что показано на верхней и нижней половинах рис. 10. При этом направление вращения следует определять для каждой пары электронов, смотря снаружи вдоль оси симметрии на ядро. Направление вращения электронов играет существенную роль при образовании двойников.

При отражении тороида в плоскости симметрии направление вращения тороида сохраняется. Именно поэтому следует говорить не о векторах, а о псевдовекторах механических и магнитных моментов и вместо федоровских групп симметрии пользоваться шубниковскими.

Особенностью описанных представлений является также то, что равенство нулю суммарных механических и магнитных моментов многоэлектронного атома вовсе не требует его сферической симметрии. Достаточно тетраэдрической или другой симметрии, при которой каждый отдельный электрон или пара электронов имеют отличные от нуля моменты, но геометрическая сумма симметрично расположенных в пространстве моментов равняется нулю. Это представление весьма помогает разбираться в формах не только атомов, но и молекул и кристаллов, что будет видно из дальнейшего изложения.

По-видимому, наряду с основным видом торотетраэдрической замкнутой неонообразной оболочки может существовать и другой вариант восьмиэлектронной $2s^2p^6$-оболочки. Он образуется, если при захвате фторообразным ионом очередного десятого (восьмого внешнего) электрона последний будет затянут с противоположной от седьмого внешнего электрона стороны оболочки вдоль тройной оси симметрии, по которой значение экранирующего заряда также минимально. Тогда образуется оболочка, состоящая из трех двухэлектронных тороидов, мгновенные оси вращения которых будут расположены в одной плоскости под углом 120° одна к другой (аналогично кислородообразной оболочке), а два неспаренных электрона замыкают оболочку сверху и снизу вдоль тройной оси симметрии (рис. 11).

Электроны в тороидах за каждый оборот будут четыре раза располагаться один относительно другого по углам октаэдра, два раза — по углам треугольной призмы и один раз — по углам плоского шестиугольника. Неспаренные электроны будут все время находиться на тройной оси симметрии L^3 против центров граней этих октаэдров.

Элементы симметрии такой оболочки будут следующими: одна тройная ось симметрии L^3, три двойных оси симметрии L^2, расположенные под углом 120° одна к другой; три плоскости симметрии P, проходящие вертикально через эти оси, и одна плоскость симметрии P, расположенная перпендикулярно к тройной оси симметрии (рис. 12).

Таким образом, данная электронная оболочка будет иметь кристаллографическую формулу L^33L^24P и относиться к гексагональной сингонии — гироидо-тригональному виду симметрии.

Приводим схемы магнитных силовых линий для рассмотренного гексагонального типа электронной оболочки неона в двух проекциях: сбоку и в плане (рис. 13). Как и в предыдущем случае, следует ожидать существования оболочек и с правым, и с левым вращением электронов в тороидах.

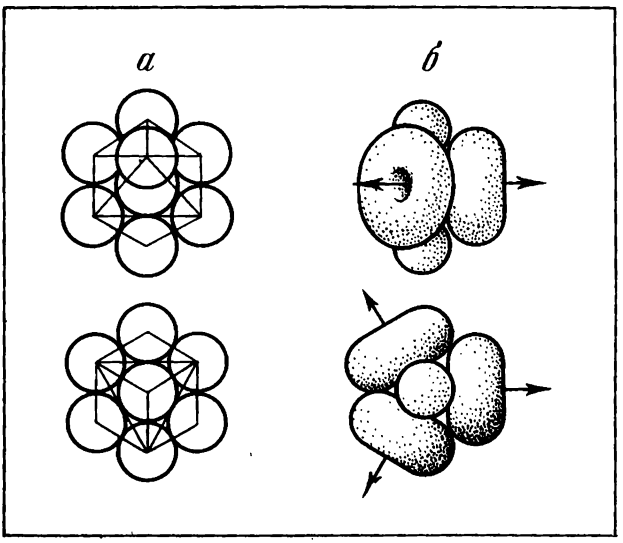


Рис. 11. Схема второго варианта электронной оболочки неона в двух проекциях

а — мгновенная упаковочная схема; *б* — три тороида и два неспаренных электрона

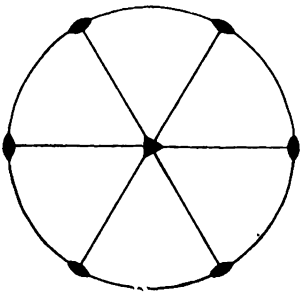
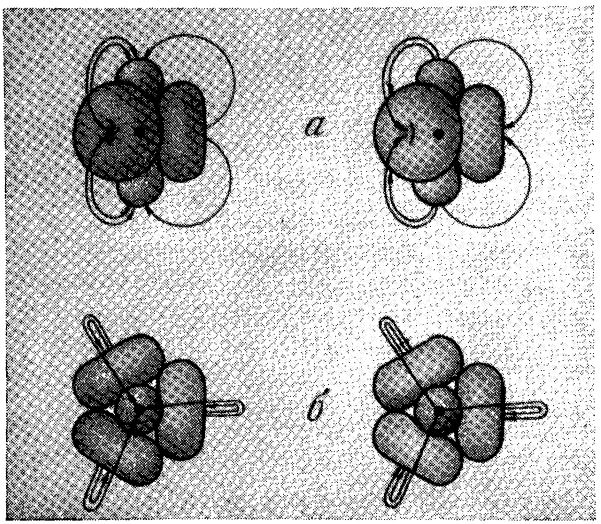


Рис. 12. Элементы симметрии второго варианта электронной оболочки неона

Рис. 13. Форма магнитных силовых линий второго варианта неонообразной электронной оболочки

а — вид сбоку; *б* —план



Наличие тетраэдрической и гексагональной модификации неонообразной электронной оболочки играет существенную роль в явлениях полиморфизма кристаллов.

На рис. 10 видно, что ядро атома неона настолько плотно экранировано со всех сторон четырьмя наружными тороидами, что одиннадцатому (девятому внешнему) электрону негде уместиться возле ядра на одном и том же расстоянии от него с предыдущими восемью электронами. Этот электрон должен либо разрушить эту оболочку при внедрении в нее, если его энергия достаточно велика, либо расположиться по линии минимальной экранировки против одного из углублений второй торотетраэдрической оболочки, если его энергия недостаточна для ее разрушения. Следовательно, одиннадцатый и последующие электроны должны будут начать построение новой, третьей электронной оболочки атома.

Итак, произведя последовательное построение второй электронной оболочки атомов и ионов, мы выяснили, что она должна закончиться десятым (восьмым внешним) электроном. Сопоставляя количество электронов во второй оболочке с таблицей Менделеева и с числом изоэлектронных рядов во втором их пучке, заметим, что, действительно, во втором периоде имеется как раз восемь элементов.

Электронные оболочки III и последующих периодов таблицы Менделеева

Так как на второй неонообразной электронной оболочке имеется два вида углублений: в промежутках между тороидами и в центрах тороидов (по четыре углубления каждого вида), по которым экранировка достигает минимального значения, то четыре электрона третьей оболочки (от натрия до кремния) расположатся по углам тетраэдра против стыков тороидов (рис. 14). Остальные четыре для атомов (от фосфора до аргона) разместятся на несколько большем расстоянии от ядра, тоже по тетраэдру, но повернутому на 90° вокруг одной из осей симметрии (рис. 15). На рис. 15 первая четверка электронов изображена малыми темными шарами, а вторая — светлыми шарами несколько большего размера.

Форма электронной оболочки аргона — это комбинация двух взаимно проникающих тетраэдров, из которых один больше другого, т. е. это тригон-тритетраэдр, или искаженный куб, у которого четыре угла из восьми несколько выдаются наружу, а остальные четыре — западают внутрь.

Если бы тороиды представляли собой непрерывный кольцевой ток, то можно было бы ожидать, что упакованные на них электроны третьей $3s^2p^6$-электронной оболочки не имели бы орбитального движения, а только вращались бы вокруг своих осей. Однако, как было найдено, экранирующие заряды для всех электронов третьей оболочки меньше (N — 1). Это значит, что одних сил взаимного отталкивания электронов недостаточно для предотвращения падения их на ядро в направлении минимальной экранировки. Следовательно, электроны третьей и других наружных оболочек должны также удерживаться от падения на ядро действием центробежных сил. Их расчет нужно вести в другом подпространстве.

Как было видно на рис. 8, в момент расположения электронов второй оболочки по углам куба места минимума экранировки соответствуют не центрам тороидов, а центрам граней этих мгновенных кубов. При движении электронов второй оболочки кубы будут деформироваться и периодически

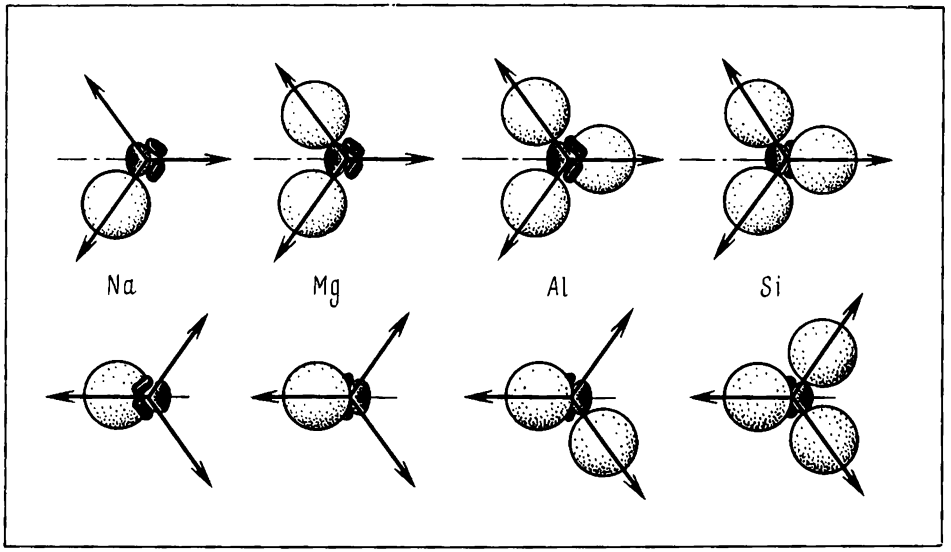


Рис. 14. Схемы электронных оболочек атомов натрия, магния, алюминия и кремния

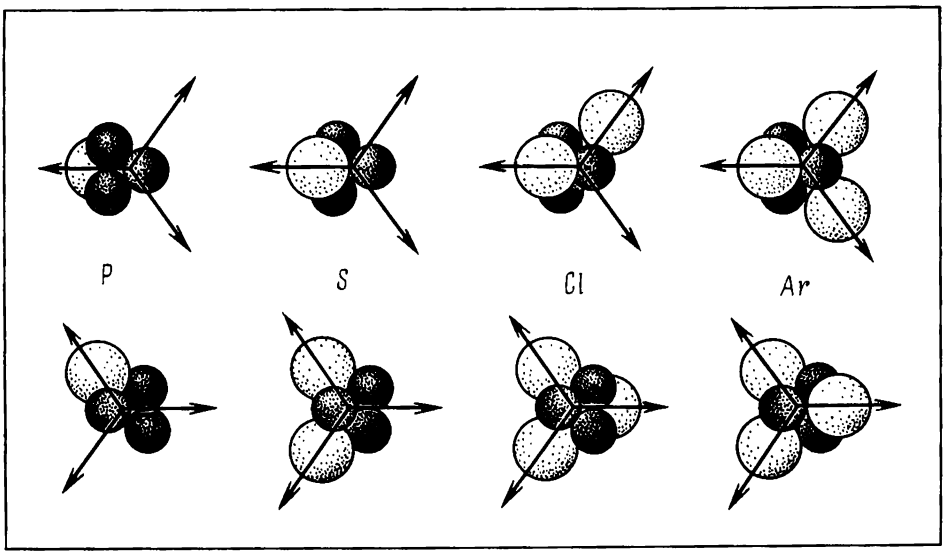


Рис. 15. Схемы электронных оболочек атомов фосфора, серы, хлора и аргона

возникать вновь. При этом направления минимальной экранировки будут перемещаться в пространстве вокруг оси вращения каждого из тороидов. Электроны третьей оболочки, стремясь следовать за направлениями минимума экранировки, будут описывать, оставаясь внутри тороида, некоторую меньшую по размерам траекторию вокруг направления тройных осей симметрии L^3. Поэтому изображение одиночных электронов третьей и других внешних

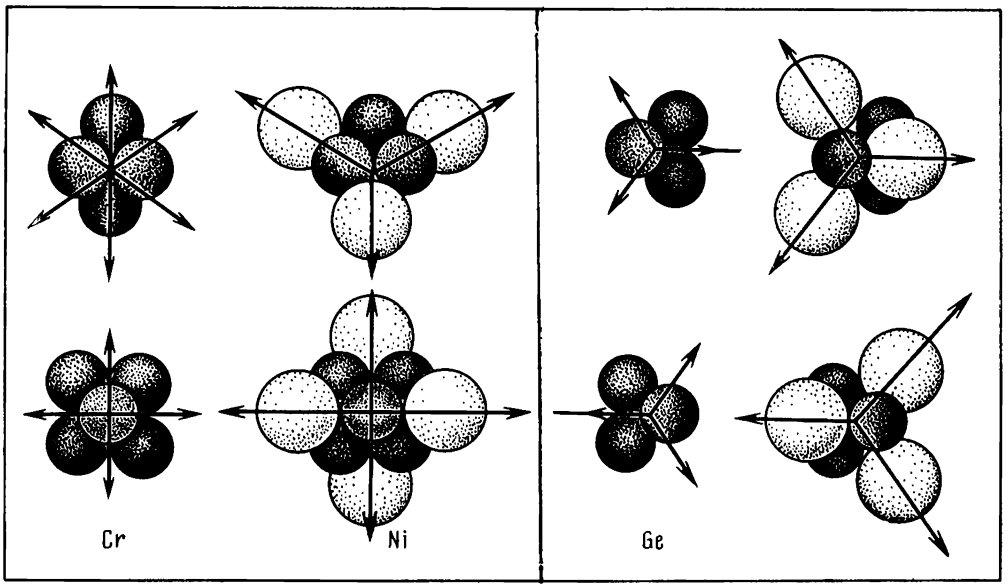


Рис. 16. Схемы электронных оболочек атомов хрома и никеля

Рис. 17. Схемы электронных оболочек атомов германия и криптона

оболочек в виде шаров является только первым приближением. Их следовало бы изображать в виде эллипсоидов вращения, сплюснутых вдоль осей L^3.

Кроме того, в свободных атомах электроны третьей внешней оболочки в своем орбитальном движении будут стремиться повторять движения прецессии и нутации электронов внутренней по отношению к ним второй электронной оболочки.

Больше восьми электронов уместиться в третьей электронной оболочке не может. Следующий электрон может или разрушить эту оболочку, если он подлетает к ней с излишне большой скоростью, или же расположиться снаружи от нее, начав построение следующей, четвертой оболочки.

Сопоставив это с таблицей элементов Менделеева, заметим, что действительно аргоном заканчивается третий период, в котором имеется восемь элементов. То же следует из диаграммы (см. раздел II, гл. 4), на которой видно, что аргон соответствует концу очередной группы (пучка) изоэлектронных рядов, в котором имеется восемь изоэлектронных рядов.

Рассмотрим теперь построение четвертой электронной оболочки. В середине каждого из шести ребер тригон-тритетраэдрической третьей электронной оболочки (или в центрах шести граней искаженного куба) имеется по углублению с минимальной экранировкой, куда и будут прежде всего затянуты шесть электронов четвертой оболочки, которые расположатся по углам октаэдра и образуют хромообразную оболочку (рис. 16).

В центрах граней этого октаэдра — восемь углублений по тройным осям симметрии с минимальной экранировкой. Однако четыре из них будут заняты выступающими изнутри электронами третьей электронной оболочки, расположенными по большему из тетраэдров. Поэтому в углублениях хромоподобной оболочки сможет разместиться первоначально не восемь, а только

четыре электрона, которые совместно с предыдущими шестью образуют 10-электронную оболочку никеля или подобных ему ионов меди, двойных ионов цинка и т. д. (см. рис. 16).

Эта десятиэлектронная $3d^{10}$-оболочка будет иметь вид тетраэдра, каждая грань которого состоит из шести (двух троек) плотно упакованных электронных облаков. Следующие электроны вынуждены будут ложиться уже поверх этой замкнутой оболочки, т. е. начать построение новой, пятой оболочки. Действительно, в таблице элементов Менделеева четвертый ряд четвертого периода, заканчивающийся никелем, состоит из десяти атомов. Четвертая группа (пучек) изоэлектронных рядов тоже содержит их десять.

Если сопоставить полученный результат с квантовомеханическим расчетом для гибридизированной $3d^{10}$-оболочки, то легко заметить, что она состоит из двух групп электронов. Одна из них содержит шесть электронов, расположенных по углам октаэдра и вращающихся вокруг трех четверных осей симметрии этого октаэдра, а вторая включает четыре электрона, вращающихся вокруг тройных осей симметрии тетраэдра. Таким образом, оказалось, что и для этого случая форма электронной оболочки, полученная методом последовательной упаковки электронов многоэлектронных атомов в места минимальной экранировки предыдущей электронной оболочки, практически получается той же, которая вытекает из квантовых расчетов гибридизированных оболочек.

При захвате следующих электронов первая их четверка расположится против граней тетраэдрической никельобразной оболочки. При этом каждый новый электрон будет экранирован в первую очередь ближайшей к нему шестеркой электронов и потому должен будет находиться на большем расстоянии от ядра, чем предыдущие электроны. Эта четверка электронов пятой оболочки расположится по углам тетраэдра, образуя оболочку германия (рис. 17), аналогичную оболочке кремния (см. рис. 14).

Против центров граней этого промежуточного тетраэдра расположится вторая четверка электронов на большем расстоянии от ядра, образуя вместе с первой восьмиэлектронную $4s^2p^6$-оболочку криптона (см. рис. 17), аналогичную восьмиэлектронной $3s^2p^6$-оболочке аргона (см. рис. 15). Разница между ними будет заключаться только в том, что выступающие и запавшие углы поменяются местами.

Поскольку формы электронных оболочек криптона и аргона аналогичны, можно сделать правдоподобное предположение о том, что и порядок упаковки на них последующих электронов шестой $4d^{10}$- и седьмой $5s^2p^6$-оболочек будет аналогичен порядку упаковки четвертой $3d^{10}$- и пятой $4s^2p^6$-оболочек. Следовательно, в шестой оболочке должно быть $6 + 4 = 10$ электронов, а в седьмой $4 + 4 = 8$. В обоих оболочках вместе их будет 18.

Сопоставляя количества электронов в оболочках с количеством атомов в рядах таблицы Менделеева, заметим, что числа элементов в шестом и седьмом рядах пятого периода действительно равны десяти и восьми. Числа изоэлектронных рядов в четвертой и пятой группах (пучках) равняются числам рядов в шестой и седьмой группе (пучке) изоэлектронных рядов (по 10 и 8 соответственно).

Разница между наружными электронными оболочками четвертого и пятого периодов таблицы Менделеева (пятого и седьмого ее рядов и пятой и седьмой электронной оболочки) будет заключаться только в том, что выступающие и запавшие углы поменяются местами.

Продолжая по аналогии это построение дальше, заметим, что на упако-

ванной ксенонообразной оболочке (54-й изоэлектронный ряд) может быть упаковано шесть электронов, ориентированных по октаэдру, а на них еще четыре электрона, расположенных по тетраэдру.

Но для заполнения $4f^{14}$-оболочки требуется не десять электронов, как в предыдущих d-оболочках, а четырнадцать, т. е. на четыре электрона больше. Поэтому продолжая упаковку, добавим к ним еще один тетраэдр и получим в данной оболочке $6 + 4 + 4 = 14$ электронов. Эта граница в таблице Менделеева четко не проявляется. Зато она хорошо видна на диаграмме изоэлектронных рядов.

Далее электроны расположатся по октаэдру и упакованному на нем тетраэдру, т. е. образуют группу из $6 + 4 = 10$ электронов, которая вместе с предыдущей группой даст $4f^{14}5d^{10}$-подоболочку из $14 + 10 = 24$ электронов, соответствующему восьмому ряду таблицы Менделеева (включая лантаниды). Такая группировка в два пучка из 14 и 10 изоэлектронных рядов хорошо видна на той же диаграмме.

Продолжая упаковку, найдем, что поверх уже построенных электронных оболочек может быть упаковано еще $4 + 4 = 8$ электронов $6s^2p^6$-оболочки, имеющей вид двух взаимно проникающих тетраэдров или искаженного куба, т. е. аналогичный ранее рассмотренным s^2p^6-оболочкам из восьми электронов. Эта оболочка будет соответствовать девятому ряду шестого периода таблицы Менделеева, содержащему восемь элементов. Ею будет заканчиваться шестой период таблицы, содержащий $24 + 8 = 32$ элемента.

Дальше картина последовательной упаковки электронов снова повторится, т. е. образуются оболочки, состоящие из $6 + 4 + 4 = 14$ электронов, затем — из $6 + 4 = 10$ электронов и из $4 + 4 = 8$ электронов, а всего будет 32 электрона. Они будут соответствовать незаконченному сейчас седьмому периоду таблицы Менделеева, в который должны входить также 32 элемента, но который, включая актиниды, состоит пока всего из 18 элементов и заканчивается элементом $Z = 104$ вместо гипотетического $Z = 118$. Из-за конкуренции $6s^2$-электронов во внешних электронных оболочках граница $5f^{14}$-оболочки в таблице Менделеева пока четко не выделена. Зато она видна на диаграмме группировки изоэлектронных рядов. Порядок упаковки электронов после 54-го изоэлектронного ряда сведен в табл. 28.

Безмасштабная схема (рис. 18) взаимной ориентировки электронов в электронных оболочках построена следующим образом. Ядра атомов совмещены с центром диаграммы. Электроны, соответствующие концам рядов таблицы Менделеева, показаны кружками увеличенного диаметра, а соответствующие концам периодов — большими кружками. Электроны, располагающиеся в виде объемных симметричных фигур кубической сингонии, представлены в виде их проекций на экваториальную плоскость куба, параллельную двум его граням и совмещенную с плоскостью чертежа. Вид на электронные оболочки дан вдоль одной из двойных осей симметрии L^2, проходящей через центры граней базисного куба перпендикулярно к плоскости чертежа. Остальные две двойные оси L^2 расположены горизонтально и вертикально в плоскости чертежа. Четыре тройные поворотные оси L^3, расположенные под тетраэдрическими углами одна к другой, в данной проекции будут соответствовать диагональным линиям, расположенным под углами 45° к горизонтали и вертикали чертежа. Все электроны изображены кружками, помещающимися на соответствующих осях. Электроны внутренних оболочек показаны ближе к центру диаграммы, а внешних — дальше от него. Однако в целях уменьшения размера диаграммы вместо квадратичного радиального масшта-

Таблица 28

Порядок упаковки симметричных электронных фигур

Z	Таблица Менделеева: период	Таблица Менделеева: ряд	Электронная оболочка	Форма упаковки	Число электронов
55—68	VI	8	$4f^{14}$	Октаэдр Тетраэдр » Итого	6 4 4 14
69—78	VI	8	$5d^{10}$	Октаэдр Тетраэдр Итого	6 4 10
79—86	VI	9	$6s^2p^6$	Тетраэдр » Итого	4 4 8
				Всего	32
87—100	VII	10	$5f^{14}$	Октаэдр Тетраэдр » Итого	6 4 4 14
101—110	VII	10	$6d^{10}$	Октаэдр Тетраэдр Итого	6 4 10
111—118	VII	11	$7s^2p^6$	Тетраэдр » Итого	4 4 8
				Всего	32

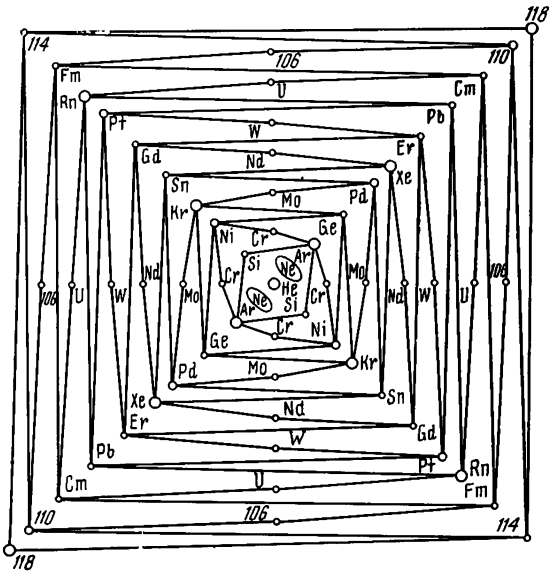


Рис. 18. Схема взаимной ориентировки электронных оболочек

ба условно принят арифметический. Порядок упаковки электронов показан системой линий, соединяющих проекции электронов.

Самая внутренняя сферически-симметричная $1s^2$-электронная оболочка гелия изображена кружком в центре диаграммы. Следующая, неонообразная $2s^2p^6$-гибридизированная электронная оболочка, состоящая из четырех тороидов, ориентированных вокруг тройных осей, показана в виде двух эллипсов, которые находятся выше экваториальной плоскости проекций и ориентированы поперек двух тройных осей симметрии куба. Два других эллипса, находящихся ниже плоскости проекций на диаграмме, не показаны. Из четырех электронов кремнийобразной оболочки на проекции будут видны только два верхних угла тетраэдра, упакованных на стыках тороидов, т. е. вдоль других тройных осей симметрии. Поскольку эти электроны расположены снаружи неонообразной оболочки, они показаны на большем расстоянии от центра диаграммы, чем электроны неона. Электроны аргонообразной оболочки ($3s^2p^6$) расположены по тетраэдру, но на проекции видны будут только верхние два из них. Они будут помещены дальше от центра, чем электроны кремнийобразной оболочки на тройных осях, идущих на проекции под углом 90° относительно тройных осей симметрии кремнийобразной оболочки. Линии, соединяющие проекции электронов кремний- и аргонообразной упаковки, вследствие этого направлены по сторонам не квадрата, а ромба.

Дальше происходит заполнение хромообразной оболочки, но ее электроны располагаются не по тройным, а по двойным L^2 осям симметрии (по углам октаэдра) и потому на диаграмме будут размещены на вертикальной и горизонтальной осях, на большем расстоянии от центра, чем электроны аргонообразной оболочки. Из этих электронов будут видны только четыре, находящиеся в плоскости чертежа, остальные два, помещающиеся на оси L^2, перпендикулярной к плоскости чертежа, проектируются в центр диаграммы и потому не могут быть показаны, не затеняя внутренней $1s^2$-оболочки. Следующие четыре электрона, заканчивающие построение тетраэдрической никельобразной $3d^{10}$-оболочки, снова расположатся на диагональных линиях, при-

чем видны будут только два верхних. Конкурирующие с d-электронами $4s$-электроны во избежание осложнений на схеме вообще не показаны.

Дальнейшее построение диаграммы ясно из рис. 18. Как видим, электронные оболочки аргона и ксенона будут подобны по форме и одинаково ориентированы в пространстве. Оболочка криптона, также подобная им по форме, будет ориентирована так, что выступающие и запавшие углы тетраэдров поменяются местами. Это же относится и к оболочке радона.

Каждая последующая оболочка ориентируется по отношению к предыдущей так, что их электроны располагаются в шахматном порядке, когда последующие электроны размещаются против промежутков между предыдущими, так как в этих местах находятся минимумы экранировки. Эти минимумы являются глубокими только в том случае, если радиальные размеры смежных оболочек различаются относительно мало. При большой разнице в радиусах оболочек они становятся весьма пологими, и потому форма поля экранирующего заряда приближается к сферической. Таким образом, ориентирующее действие на электроны оказывают в основном только электроны смежной с ними электронной оболочки. Поэтому электроны, разделенные двумя или более оболочками, могут оказаться на одной и той же оси симметрии, например электроны кремний- и никельобразных или аргоно- и германийобразных оболочек (см. рис. 18).

К такому выводу можно прийти и путем анализа разностей экранирующих зарядов аналогичных электронных оболочек [1]. Эти разности только немного отличаются от разностей чисел электронов в сравниваемых оболочках, что свидетельствует о приблизительно сферической симметрии экранирующих зарядов для удаленных одна от другой оболочек.

Сопоставление данных о свойствах электронных оболочек атомов

Приводим сводку данных о строении электронных оболочек атомов элементов таблицы Менделеева (рис. 19). По оси абсцисс отложены номера изоэлектронных рядов от начала каждой их группы или пучка, нанесены удвоенные квадраты целых чисел (2, 8, 18, 32) и проставлены значения азимутальных квантовых чисел l. Через точки деления проведены вертикальные прямые линии. По оси ординат отложены безразмерные величины относительных энергий связи электронов с ядром по отношению к самому глубокому уровню для водорода

$$\sqrt{\frac{I_{\text{н}} - I_1}{R}} + 1,$$

а также проставлены атомные номера элементов Z вплоть до гипотетического элемента $Z = 118$ для концов периодов и рядов таблицы Менделеева. Через эти точки проведены горизонтальные линии. Концы периодов обозначены сплошными линиями, концы рядов — пунктирными, так же как и границы оболочек, опущенные в таблице Менделеева.

Через узлы полученной прямоугольной сетки проведены диагональные, параллельные парные прямые линии, между которыми в получившихся ромбах записаны атомные номера элементов Z. Конкурирующие электроны отмечены узкими параллелограммами. Главные квантовые числа n записаны у правых концов наклонных прямых (см. рис. 19).

Номера периодов и рядов таблицы Менделеева проставлены слева от диаграммы, а числа элементов в них — справа. Внизу диаграммы указаны

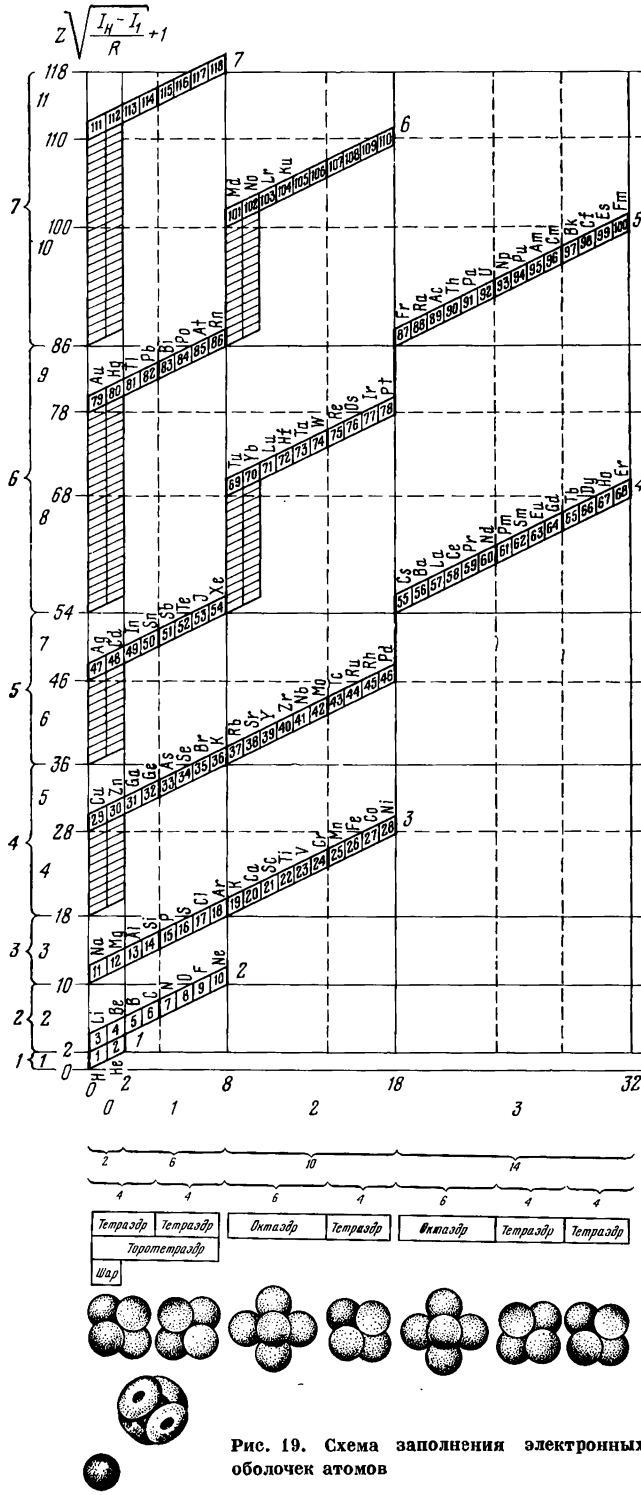


Рис. 19. Схема заполнения электронных оболочек атомов

числа электронов в рассмотренных симметричных фигурах или оболочках и даны их наименования. Еще ниже без масштаба изображены формы этих фигур, расположенных против соответствующих мест диаграммы, на которой вертикальными пунктирными линиями отмечены границы заполнения этих фигур. Эти же границы обозначены жирными линиями между наклонными прямыми.

Анализируя рис. 19, необходимо отметить следующее.

Концы периодов таблицы Менделеева характеризуются резким скачком свойств от инертных газов к щелочным металлам. Заполнение электронных уровней для главных квантовых чисел n не совпадает с этим делением. Скачкам отвечает заполнение гибридизированных s^2p^6-оболочек, состоящих из восьми электронов. Концы рядов таблицы Менделеева выражены менее резко, так как с обеих сторон границы находятся металлы. Граница заполнения f-электронных оболочек выражена наиболее слабо и замаскирована влиянием конкурирующих s-электронов, так что в таблице Менделеева она не отмечена.

Завершение построения выведенных симметричных электронных фигур, показанных на графике внизу, совпадает с границами периодов таблицы Менделеева (сфера для первого двухэлементного периода, торотетраэдр или два тетраэдра для всех остальных периодов). Завершение симметричных фигур, состоящих из октаэдров и тетраэдров, упакованных один на другом, соответствует границам рядов этой таблицы, а также заполнению d^{10}- и f^{14}-оболочек.

Если исходить из симметричных электронных фигур, то следует ожидать более дробного и менее четко выраженного разделения рядов и периодов таблицы Менделеева. Так, все восьмиэлементные ряды должны делиться на две равные части по четыре элемента (тетраэдр и тетраэдр), а десятиэлементные ряды переходных металлов — на две неравные части: из шести и четырех элементов (октаэдр и тетраэдр) и, наконец, двадцатичетырехэлементные ряды — на три части из $6 + 4 + 4$ элементов (октаэдр и два тетраэдра) и две части из $6 + 4$ элементов (октаэдр и тетраэдр).

Для проверки этого правдоподобного предположения рассмотрим диаграммы зависимости температур плавления элементов (рис. 20) и твердостей элементов (рис. 21) от их атомных номеров Z. Ясно видно, что четвертые элементы восьмиэлементных рядов, т. е. углерод ($Z = 6$), кремний ($Z = 14$), германий ($Z = 32$), олово ($Z = 50$) и свинец ($Z = 82$), а также шестые элементы десятиэлементных рядов, т. е. хром ($Z = 24$), молибден ($Z = 42$) и вольфрам ($Z = 74$), характеризуются максимальными температурами плавления и твердостями по сравнению со своими соседями. При этом для четвертых элементов восьмиэлементных рядов температуры плавления по мере роста номера электронной оболочки уменьшаются, но вместе с тем возрастают температуры плавления элементов, следующих за ними. Поэтому для олова ($Z = 50$) она ниже, чем для следующей за ним сурьмы ($Z = 51$), которая к тому же не плавится, а сублимирует. Наоборот, для шестых элементов десятиэлементных рядов переходных металлов с ростом номера оболочки максимумы температур плавления растут. Для лантанидов выделить пиковые значения этих температур затруднительно, а для актинидов — опытных точек почти нет.

Аналогичные зависимости имеют место и для твердостей элементов.

Таким образом, наличие пиковых значений температур плавления и твердостей указанных элементов, начинающих соответствующие изоэлектрон-

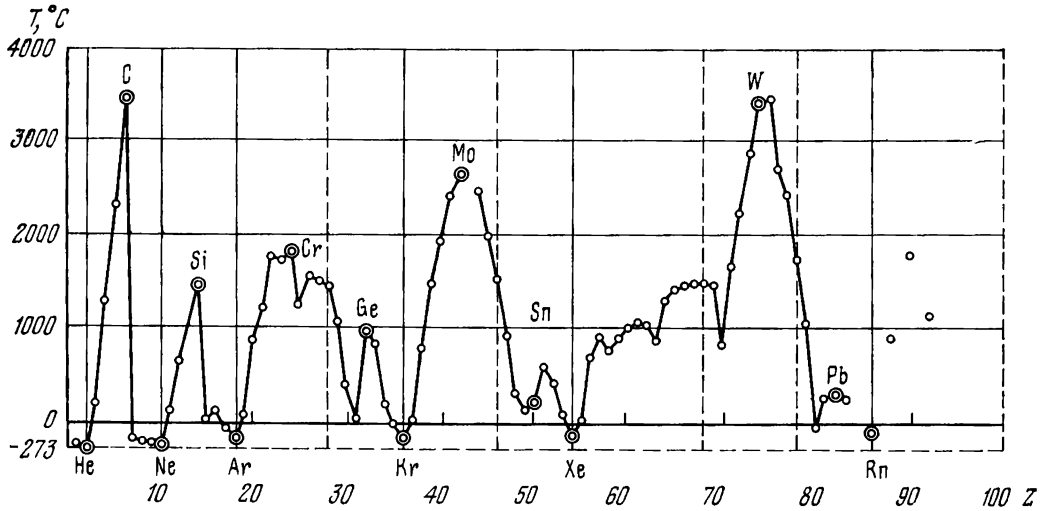


Рис. 20. Зависимость температуры плавления T от атомных номеров элементов Z

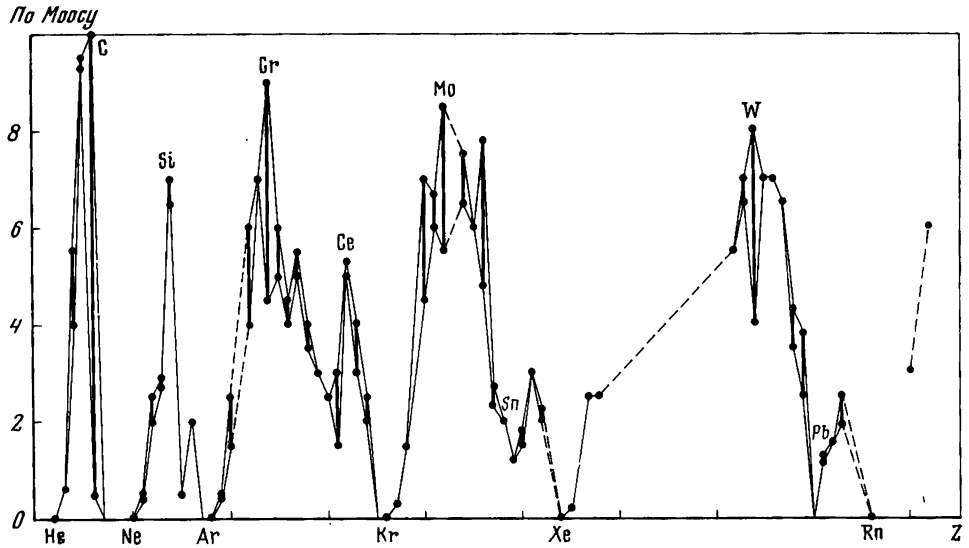


Рис. 21. Зависимость твердости элементов от их атомных номеров

ные ряды, является существенным подтверждением того, что электронные оболочки в виде тетраэдров и октаэдров действительно существуют.

Наиболее четко такая граница проявляется во втором периоде таблицы Менделеева. Так, первые четыре элемента этого периода (литий, бериллий, бор и углерод) представляют собой твердые тела, а вторая четверка (азот, кислород, фтор и неон) — газы. В остальных восьмиэлементных периодах эта разница менее заметна, но все же существует как граница между металлами и металлоидами.

Дополнительное подтверждение наличия некоторой границы в порядке заполнения электронных оболочек можно проследить на примере хрома ($Z = 24$). Плавные кривые зависимости атомных объемов от атомных номеров элементов в области между хромом и марганцем имеют скачок (рис. 22). Аналогичные скачки заметны на таких же кривых между молибденом и технецием, а также между вольфрамом и рением, но там они менее выражены.

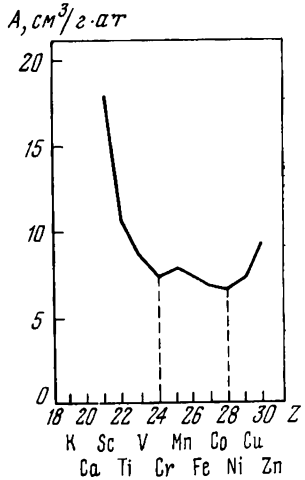
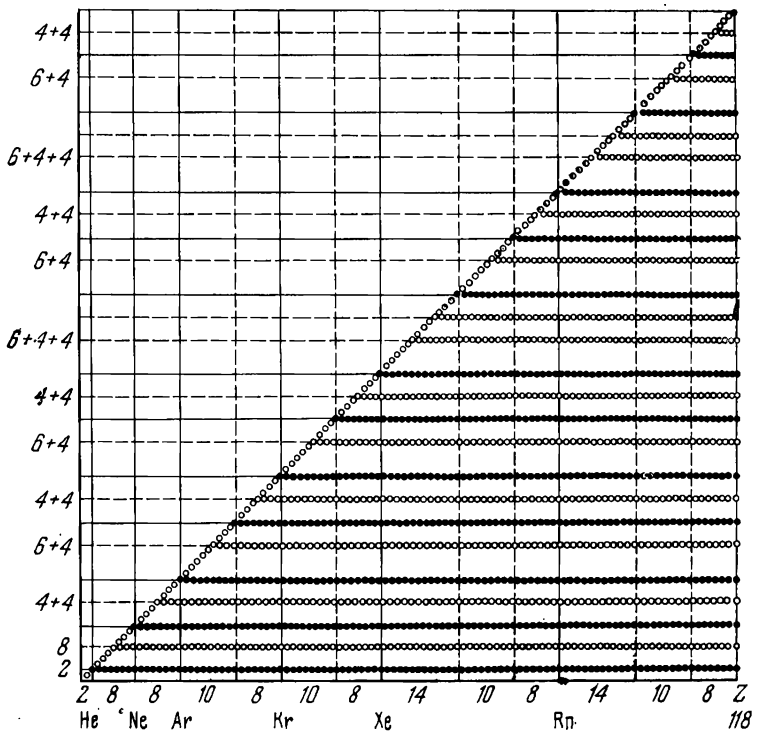


Рис. 22. Аномалия изменения атомных объемов при изменении заряда ядра Z

Рис. 23. Порядок упаковки электронных фигур



Порядок заполнения электронных оболочек по квантовым числам и по симметричным фигурам различен. Вследствие конкуренции s^2-, d^{10}- и f^{14}-состояний заполнение энергетических уровней, соответствующих главным n и азимутальным l квантовым числам, происходит с многочисленными нарушениями водородоподобной последовательности, только отчасти описанными правилами заполнения $(n + l)$-групп Клечковского. В то же время построение симметричных электронных фигур происходит строго последовательно без перерывов и нарушений. Каждая новая фигура начинает заполняться только после того, как завершено построение предыдущей фигуры или оболочки. Однако между этими двумя разными порядками нет непримиримого противоречия. Просто они освещают разные стороны единого сложного явления.

Так, для переходных элементов один или два $4s$-электрона будут находиться относительно далеко от ядра и колебаться с одной частотой, а остальные конкурирующие с ними $3d$-электроны расположатся несколько ближе к ядру, и частота их колебаний будет иной. Независимо от этой разницы и те и другие электроны будут одинаково вращаться относительно двойных осей симметрии предыдущей аргонообразной оболочки, т. е. будут образовывать сначала октаэдрическую, а затем упакованную на ней тетраэдрическую оболочку.

Рассмотрим порядок упаковки симметричных электронных фигур (рис. 23). По оси абсцисс отложены атомные номера элементов Z, равные суммарному числу электронов в оболочках этих атомов. Вертикальные сплошные линии проведены на границах периодов, а пунктирные — на границах рядов. На оси ординат показано распределение электронов по симметричным электронным фигурам (оболочкам) в соответствии с изложенными представлениями. После заполнения каждой симметричной фигуры на графике отмечается верхняя граница числа электронов для данной фигуры. Заполнение оболочек происходит совершенно правильно, и каждая последующая фигура начинает заполняться только после того, как полностью заполнена предыдущая оболочка.

Сравнивая этот рисунок с рисунком, на котором показан порядок заполнения электронами квантовых уровней, заметим, что на нем нарушений значительно больше, чем порядка.

Дадим теперь сводную схему строения электронных оболочек атомов и ионов (рис. 24), аналогичную рис. 12 (см. стр. 186), однако представляющую строение уже не внутренних, а наружных электронных оболочек.

Для этого отложим по оси абсцисс атомные номера элементов Z, а по оси ординат — корни квадратные из потенциалов ионизации $\sqrt{I}$. В целях более ясного представления о строении наружных электронных оболочек вертикальный масштаб увеличим в несколько раз по сравнению с прежним.

Заменим близкие к прямым гиперболические линии изоэлектронных рядов прямыми линиями самих асимптот к ним, проведенными через начальные абсциссы $b/2$ под углами α, тангенсы которых были определены ранее. В целях упрощения пренебрежем в пределах каждой группы (пучка) изоэлектронных рядов некоторой неравномерностью расстояний между ними.

При наличии конкуренции между электронами (приводящей к пересечению изоэлектронных рядов возле их начала) спрямим пары пересекающихся рядов, приняв для них углы наклона такими же, как и для основной части этих рядов, с одинаковыми числами электронов, но отметим электроны, находящиеся в ином квантовом состоянии, чем весь изоэлектронный ряд, кружками или квадратиками (см. рис. 24).

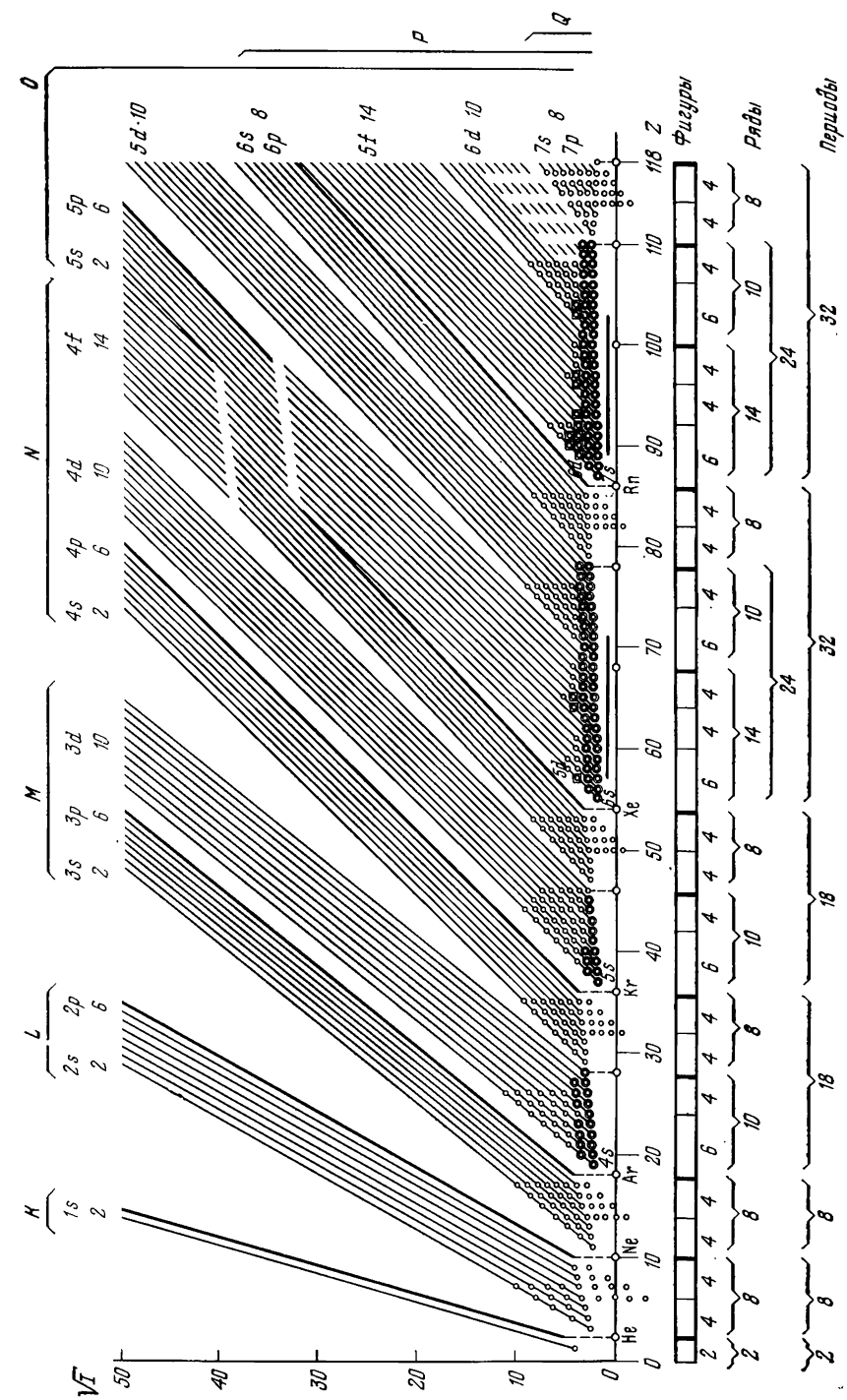


Рис. 24. Сводная схема строения электронных оболочек атомов и ионов

Валентные электроны, которые могут быть оторваны от атома или иона, и присоединяемые к ним при химических реакциях электроны обозначим малыми светлыми кружками. Изоэлектронные ряды для концов периодов таблицы Менделеева (для инертных газов) выделим жирной линией.

Сверху диаграммы укажем значения главного квантового числа n, квантовые состояния электронов в группах (пучках) изоэлектронных рядов s, p, d и f, а также соответствующие числа электронных рядов в их пучках. При наличии конкурирующих электронов, отмеченных в начальной части изоэлектронных рядов наружными кружками или квадратиками, проставим возле них соответствующие символы квантовых состояний.

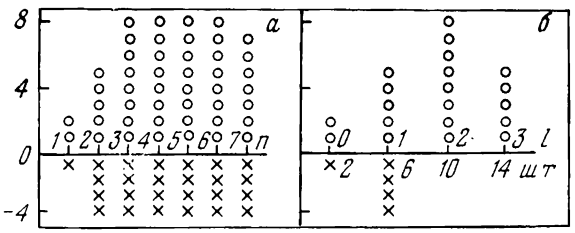


Рис. 25. Зависимость числа валентных электронов

а — от главного квантового числа n;
б — от азимутального квантового числа l

В нижней части диаграммы приведем числа электронов в симметричных электронных фигурах или оболочках, согласно изложенным положениям, и числа элементов по рядам и периодам таблицы Менделеева. Места лантанидов и актинидов укажем на диаграмме отрезками горизонтальных прямых, параллельными оси абсцисс.

Анализируя полученную схему, необходимо отметить следующее.

1. Изоэлектронные ряды объединяются в разделенные промежутками группы и пучки. Каждый такой пучок соответствует заполненным электронным оболочкам s, sp, d и f. Группы параллельных изоэлектронных рядов соответствуют одинаковым главным квантовым числам n.

2. Резкое изменение химических и физических свойств элементов (переход от инертных газов к активным щелочным металлам), согласно таблице Менделеева, соответствует заполнению двухэлектронных s^2- и восьмиэлектронных s^2p^6-оболочек. Заполнение d^{10}-оболочек дает в таблице Менделеева менее четкую границу (переход от никеля к меди, от палладия к серебру и от платины к золоту). Заполнение f^{14}-оболочек, приходящееся на 68 и 100-й изоэлектронный ряды, попадает в область лантанидов и актинидов и химически практически не проявляется.

3. Полное завершение квантовых оболочек для $n = 1$ и $n = 2$ совпадает с концами периодов таблицы Менделеева, для $n = 3$ — с концом четвертого ряда этой таблицы, для $n = 4$ в таблице Менделеева оно никак не проявляется, а для $n = 5$ и выше выходит за пределы этой таблицы. Таким образом, главное квантовое число n не играет основной роли в резком изменении химических свойств элементов по периодам.

4. Число валентных электронов, которые могут быть оторваны от атомов при химических реакциях, изменяется от одного до восьми, а число присоединяющихся электронов — от одного до четырех. Потенциалы ионизации для этих электронов обычно не превышают 120 *эв*.

Зависимость числа валентных электронов от главного квантового числа n (рис. 25) показывает, что при возрастании n максимальное число валентных электронов сначала увеличивается, затем становится постоянным и даже

начинает падать. При увеличении азимутального квантового числа l (и связанного с ним числа изоэлектронных рядов в группах — пучках) максимальное число валентных электронов сначала увеличивается, а затем падает. Присоединение электронов к ионам происходит только для p- или s-изоэлектронных рядов. В первом случае главное квантовое число $n = 1$, а во втором — оно может иметь любое значение.

Попытка построить зависимость числа валентных электронов от суммы главного и азимутального квантовых чисел $n + l$, к сожалению, также не дает какой-либо четкой зависимости.

Но раз число валентных электронов не имеет однозначной связи с квантовыми числами n и l, следовательно, квантовые числа не дают достаточной информации для оценки химических свойств атомов.

5. Отрыв валентных электронов при химических реакциях происходит для гибридизированных s^2p^6-оболочек независимо от того, будут ли эти электроны находиться в s- или p-состояниях.

У d- и f-оболочек, имеющих в начале изоэлектронных рядов конкурирующие s- или s- и d-электроны, все электроны одинаково могут быть валентными. Следовательно, с химической точки зрения важно знать общее число валентных электронов в атоме, а не то, будут ли они в s-, p-, d- или f-квантовом состоянии. Следовательно, и с этой точки зрения азимутальное квантовое число l не играет существенной роли в химических реакциях. Зато квантовые числа n и l имеют весьма важное значение в анализе спектров элементов.

6. Согласно существующим воззрениям, заполнение d-оболочек заканчивается на цинке ($Z = 30$), кадмии ($Z = 48$), ртути ($Z = 80$) и гипотетическом элементе ($Z = 112$). Однако, как следует из расположения изоэлектронных рядов (см. рис. 24), последние два изоэлектронных ряда в каждой такой оболочке будут соответствовать не d-, а s-оболочкам и на единицу большему главному квантовому числу n. На этом рисунке целесообразно вести отсчет границ оболочек не по вертикали или горизонтали, а по наклону, т. е. по группам или пучкам изоэлектронных рядов.

7. Лантаниды и актиниды не имеют четких границ, отделяющих их от смежных с ними элементов, чем собственно и объясняется помещение их в одни и те же клетки таблицы Менделеева. Из расположения изоэлектронных рядов следует, что электронные оболочки заполняются для эрбийобразного ($Z = 68$), а не для лютецийобразного ($Z = 71$), для фермийобразного ($Z = 100$), а не лауренсийобразного ($Z = 103$) рядов. Именно здесь располагаются промежутки между группами (пучками) изоэлектронных рядов.

8. На рис. 24 видно в глубине атомов пересечение не отдельных изоэлектронных рядов, а целых электронных оболочек ($5s^2p^6$, $4f^{14}$, а также $6s^2p^6$, $5f^{14}$). Таким образом, последовательность заполнения оболочек нарушается только вблизи от поверхности атомов. При больших зарядах ядра Z эти состояния в глубине атомов меняются местами и водородоподобная последовательность восстанавливается.

К такому же выводу можно прийти, анализируя построенные Мозели [5] диаграммы рентгеновских термов, которые имеют в этих местах двойной зигзагообразный перегиб (см. рис. 9, стр. 162). По-видимому, это обстоятельство не было замечено исследователями, так как изучение оптических спектров лантанидов проводилось вследствие очень большой их сложности только при малых степенях ионизации.

9. Границы симметричных электронных фигур, показанные в нижней части рис. 24, совпадают как с границами рядов и периодов таблицы Менде-

леева, так и с границами групп (пучков) изоэлектронных рядов. В то же время симметричные фигуры дают еще более дробные подразделения изоэлектронных рядов.

Если сопоставить схемы симметричных электронных оболочек атомов со схемами строения атомных ядер, то легко заметить, что расположение осей конусов анизотропии ядер в пространстве получается там же, где и положение осей симметрии электронных оболочек атомов. Это соответствие явно неслучайно. Возможно, в дальнейшем его удастся использовать для воздействия на симметрию и свойства атомов.

Формы электронных оболочек многоэлектронных атомов, обоснованные принципами симметрии и минимальной экранировки, были получены нами много раньше [1—3], чем это удалось сделать квантовомеханическими расчетами гибридизированных оболочек [6]. Совпадение этих форм показывает, что принцип минимальной экранировки, несмотря на его простоту, весьма плодотворен. Он дает правильную информацию об угловом распределении электронов в оболочках, но нуждается в дополнительных данных для уточнения этого распределения по радиусам.

Литература

1. *М. М. Протодьяконов.* Свойства породообразующих минералов и их электронное строение. М., «Наука», 1969.
2. *М. М. Протодьяконов.* Гипотеза о строении электронных оболочек атомов и молекул. М., изд. ИГД АН СССР, 1957.
3. *М. М. Протодьяконов.* Геометрия электронных оболочек.— Техника молодежи, 1962, № 2.
4. *В. А. Копцик.* Шубниковские группы. Справочник по симметрии и физическим свойствам кристаллических структур. М., Изд-во МГУ, 1966.
5. *М. А. Ельяшевич.* Атомная и молекулярная спектроскопия. М., Физматгиз, 1962.
6. *М. М. Протодьяконов.* Симметрия электронных оболочек атомов.— Сб. «Симметрия в природе». Л., изд. Гос. научн.-техн. горн. об-ва, 1971.

РЕЗЮМЕ

Обобщая все изложенное в данном разделе необходимо отметить следующее.

1. При исследовании форм электронных оболочек многоэлектронных атомов целесообразно пользоваться гибридизированными волновыми функциями. Вместо общепринятой сферической системы координат рекомендуется использовать направляющие косинусы относительно декартовой системы координат, что позволяет существенно упростить уравнения и сделать их симметричными. Радиальную и угловую части волновой функции нужно рассматривать совместно, доводя расчеты до изолиний равных вероятностей. Это позволяет установить, что электронные облака вероятности имеют вид тороидов вокруг осей симметрии.

   Для *sp*-гибридизации получим два соосных и параллельных один другому тороидов, для sp^2-гибридизации — три тороида с осями в одной плоскости под углом 120° и для sp^3-гибридизации — четыре тороида, оси которых расположены под тетраэдрическими углами. *d*-Электроны образуют две подоболочки из тороидов: одну октаэдрическую и другую — тетраэдрическую (см. гл. 1).
2. Для исследования механических и магнитных моментов атомов целесообразно не ограничиваться только плоскими их проекциями, а пользоваться

вращающейся пространственной системой координат. Это позволяет найти взаимно самосогласованную пространственную ориентировку моментов (см. гл. 2) в одном из подпространств, характеризующих электрон.

3. Электроны не только вращаются вокруг ядра, но и участвуют в нутации, прецессии и сильной радиальной пульсации вследствие анизотропии поля ядра. В результате траектория электрона получает вид весьма сложной пространственной многовитковой кривой, каждый виток которой имеет различные размеры и по-разному ориентирован в пространстве. Электронное оболако является усредненной, статистической картиной движения электрона вокруг ядра за много оборотов. В ТФП полное описание свойств электрона в атоме принципиально невозможно сделать в одном подпространстве. Но ТФП допускает механические траектории в одном из подпространств.
4. В первом подпространстве электроны, отталкиваясь один от другого, стремятся к такому динамическому взаимному расположению, при котором каждый из них будет в наименьшей степени экранирован от ядра зарядами прочих электронов (принцип минимальной экранировки или принцип наименьшей помехи). Это возможно только при симметричном расположении электронов, при котором их потенциальная энергия отталкивания становится минимальной (см. гл. 3).

Эквипотенциальные или изоэкранированные поверхности многоэлектронных атомов имеют ряд выступов и углублений. Выступы размещаются против электронов, а углубления — в промежутках между ними. У смежных электронных оболочек эти выступы и углубления относительно узкие и глубокие. Для отдаленных одна от другой оболочек выступы и впадины сглаживаются и изоэкранированные поверхности приближаются к сферически-симметричным.

Приближенную форму этих поверхностей можно получить, если изобразить электронные облака отдельных электронов в виде шаров, радиус которых равен половине расстояния между ближайшими электронами. При вращении электронов вокруг некоторой оси их сферические облака «размазываются» в тороиды. Углубления в центре и на стыках тороидов будут соответствовать углублениям в изоэкранированных поверхностях.

Можно, не производя детального расчета формы изоэкранированных поверхностей, указать в пространстве вокруг ядра угловые направления минимальной экранировки (центры углублений изоэкранированных поверхностей), по которым каждый последующий электрон будет стремиться упаковаться поверх оболочки из ранее захваченных электронов. Эти направления соответствуют осям симметрии электронных фигур.

5. Основными формами замкнутых симметричных электронных фигур (оболочек) будут следующие: для первого периода (два электрона)— сфера, для второго периода (восемь электронов)— торотетраэдр, а для остальных периодов и рядов — комбинации тетраэдров (четыре электрона) и октаэдров (шесть электронов), упакованных один на другом так, что внешние электроны попадают в углубления лежащей под ними внутренней электронной оболочки.

На рис. 1 приведены стереографические проекции электронных фигур для атомов концов периодов и рядов таблицы Менделеева. Электроны, относящиеся к разным электронным фигурам, упакованным одна на другой, т. е. на разных расстояниях от ядра, показаны кружками неодинако-

вых размеров. На этих, принятых в кристаллографии проекциях изображается только половина всех электронов данной оболочки, находящаяся выше экваториальной плоскости проекций.

Сферически симметричная оболочка гелия изображена одним экваториальным кругом, в торотетраэдрической оболочке неона видны только два тороида из четырех, для аргона показаны по два электрона от двух упакованных один на другом тетраэдров. Для никеля отмечены электроны тетраэдра, упакованного на октаэдре, а для эрбия — двух тетраэдров, также упакованных на октаэдре. Радиальный размер оболочки данным методом построения не регламентируется.

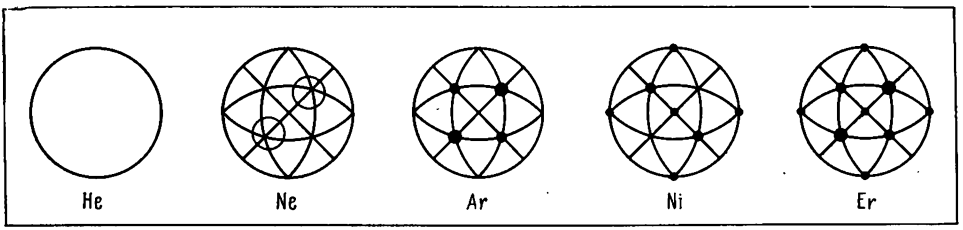


Рис. 1. Основные схемы заполнения электронных фигур

Все электронные фигуры относятся к кубической сингонии и имеют следующие элементы симметрии $3L_4^2 4L^3 6P$ (см. рис. 9). Рекомендуется пользоваться шубниковскими группами симметрии. Для неонообразных электронных оболочек возможна и другая, гексагональная форма с элементами симметрии $L^3 3L^2 4P$ (см. гл. 3, рис. 12), что является одной из причин полиморфизма.

Заполнение электронных фигур происходит последовательно, без пропусков и нарушений (см. гл. 3, рис. 23).

6. Формы построенных таким образом электронных фигур полностью соответствуют формам гибридизированных электронных облаков (см. гл. 2), вычисленным методами квантовой механики. Магнитные моменты таких гибридизированных оболочек получаются направленными по осям симметрии тороидов от ядра или к ядру, что является одной из основных причин двойникования.

Геометрическая сумма моментов всех электронов замкнутой многоэлектронной оболочки может равняться нулю, даже если оболочка и не обладает сферической симметрией (инертные газы).

Мгновенный орбитальный момент количества движения для s-электронов не равен нулю, однако за счет нутации и прецессии среднее его значение получается равным нулю.

7. Симметричные электронные фигуры, упакованные одна на другой, образуют периодическую систему, соответствующую как рядам и периодам таблицы Менделеева, так и группировке изоэлектронных рядов в пучки, связанные со значениями главного n и азимутального l квантовых чисел. Кроме того, симметричные электронные фигуры позволяют установить более дробную периодизацию, которая проявляется в пиковых температурах плавления и твердостях для каждого четвертого элемента в восьмиэлементных и каждого шестого — в десятиэлементных рядах таблицы Менделеева.

IV. СТРОЕНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ ОБОЛОЧЕК МОЛЕКУЛ

Краткий обзор вопроса о строении электронных оболочек молекул приведен в нашей монографии, изданной в 1969 г., поэтому в данной работе мы его не приводим, отсылая читателей за подробностями к литературе [1—17], и ограничимся только некоторыми замечаниями.

В последние годы некоторые авторы при изображении форм молекул пытаются использовать формы электронных оболочек атомов. Так, Ч. Коулсон [12] пишет, что наглядно орбиталь можно представить себе, нарисовав поверхность $\psi=\text{const}$ (или $\psi^2=\text{const}$) или граничную поверхность, которая характеризуется тем, что в ее пределах находится практически все зарядовое облако.

Эта рекомендация является справедливой только в той части, где говорится о том, что следует пользоваться граничной поверхностью электронной орбитали. Но тогда квадрат волновой функции необходимо умножить еще на дифференциал объема. Но в выражение этого дифференциала входят сомножители, включающие радиус оболочки и тригонометрические функции углов, о чем автор, к сожалению, забывает. А наличие этих множителей весьма существенно меняет форму граничной поверхности орбитали.

Кроме того, он не придерживается даже своей собственной рекомендации и практически во всех примерах вместо проекции граничной поверхности волновой функции на плоскость чертежа пользуется только кривой угловой составляющей волновой функции, например $\cos\theta$ или $\cos^2\theta$. Но эта кривая совсем не связана с радиусами электронных оболочек и по форме вовсе непохожа на граничную поверхность волновой функции. Поэтому пересечение подобных кривых на плоскости чертежа никакого отношения к перекрыванию электронных оболочек не имеет.

К сожалению, подобный подход довольно часто повторяется и в других работах [13, 14]. Так, Г. Грей [14] рассматривает перекрывание орбиталей атомов бора и фтора в молекуле BF_3 и приводит схемы из гантелеобразных фигур (рис. 1), хотя пересечение кривых угловых составляющих волновых функций никакого физического смысла не имеет. Для этих кривых радиусы-векторы представляют собой величины, пропорциональные плотности вероятности, а для граничных кривых они должны обозначать просто геометрические радиусы.

Помимо упомянутых источников ряд подробностей о строении и расчете молекул можно найти в работах [15—17].

В заключение приведем высказывания некоторых специалистов.

Так, Ч. Коулсон [12] пишет, что в молекуле метана имеются пять ядер и десять электронов, поэтому волновое уравнение содержит $3\cdot15=45$ независимых переменных. Пытаться точно решить дифференциальное уравнение в частных производных с таким числом переменных совершенно безнадежно. Анализ электронного строения молекулы водорода включает пять стадий, каждая из которых соответствует некоторой математической операции. Эти операции не имеют чисто математического характера; каждая из них включает элемент химической интуиции и апелляции к опыту.

П. Каррер в своей работе [3] отмечает, что современное состояние этой теории (квантовой химии.— *М. П.*) таково, что, за исключением простейших молекул и ионов (H^-, H_2^+ и H_2), расчеты могут быть выполнены только приближенно, и то лишь при использовании сложного математического аппарата. Чем точнее эти расчеты, тем дальше они в большинстве случаев от простых химических формул; из них исчезают элементы наглядности, полученные результаты трудно поддаются физической интерпретации и уже не могут быть использованы химиками в их повседневной работе по расщеплению и синтезу сложных органических веществ.

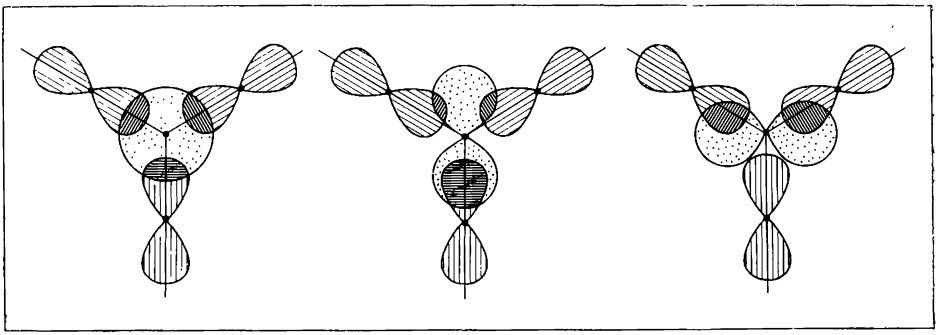


Рис. 1. Схема перекрывания орбиталей по Г. Грею

При сближении нескольких атомов их наружные электроны будут отталкиваться один от другого и притягиваться к ядрам соседних атомов. Это приведет к перестройке форм электронных оболочек атомов. Так как силы взаимодействия убывают обратно пропорционально квадратам расстояний между частицами, перестройка в основном будет определяться взаимодействием ближайших ядер и электронов. Однако в ряде случаев влияние конусов анизотропии может сильнее сказаться не на ближайших, а на более далеких соседях, но зато попадающих на поверхности конусов анизотропии.

Атомы со слабо связанными электронами (в начале периодов) будут терять их, при этом у них останутся только внутренние электронные оболочки, имеющие формы оболочек инертных газов предыдущего периода. Эти положительно заряженные ионы (катионы) по размеру получатся меньше нейтральных атомов.

Атомы с большим сродством к электрону (в концах периодов) захватывают дополнительные электроны, образуя отрицательные ионы (анионы), аналогичные по форме оболочкам инертных газов данного периода. Аналогичные явления относятся и к концам рядов таблицы Менделеева и в ряде случаев — к тетраэдрическим и октаэдрическим оболочкам атомов внутри этих рядов. Каждый катион стремится окружить себя анионами, а каждый анион — катионами. Число ближайших соседей и их взаимное расположение определяются симметрией и формой взаимодействующих ионов. Подобное построение можно выполнять как для ионных, так и для ковалентных связей. Наиболее вероятным является соответствие элементов симметрии вступающих в соединение ионов; например, двойная ось симметрии одного иона будет продолжением двойной же, а не тройной оси симметрии другого.

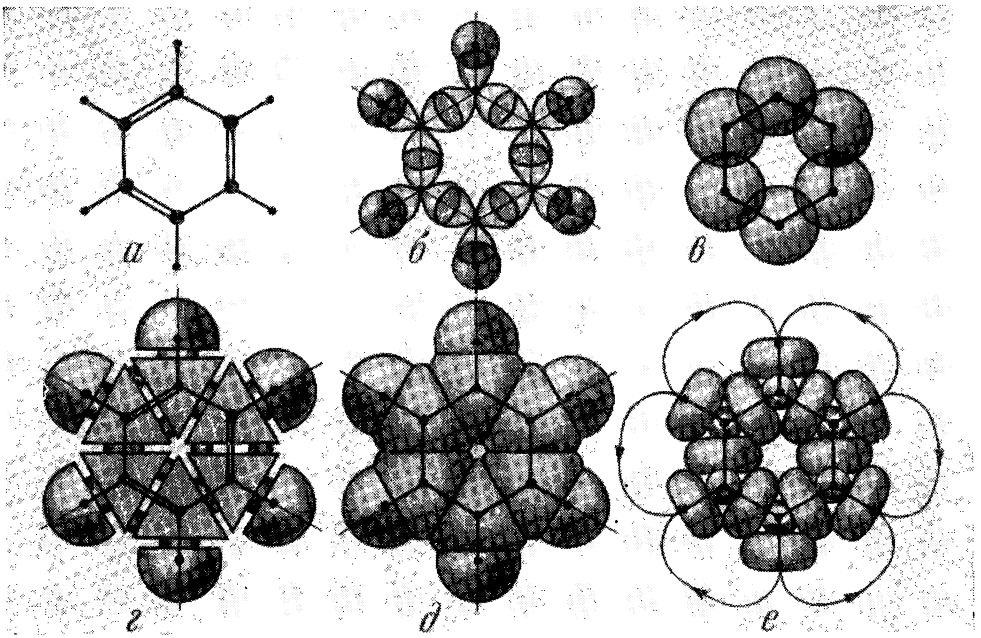


Рис. 2. Схемы строения электронных оболочек бензола

а — по Кекуле; *б* — σ-связи; *в* — π-связи; *г* — модель Коурталд; *д* — модель Стьюарта; *е* — предлагаемая модель

Ряд примеров построения разнообразных молекул приведен в нашей монографии 1969 г. Там рассмотрены электронные оболочки двухатомных молекул водорода, азота, кислорода, фтора и хлора. В качестве примеров молекул из разных атомов приведены схемы электронных оболочек молекул метана, аммиака, воды, фтористого водорода, углекислого газа и сероводорода. При этом показано, что для первых четырех молекул электронная оболочка во всех случаях имеет вид торотетраэдра, а ядра водорода располагаются против центров четырех, трех, двух и одного из тороидов. Молекула углекислого газа получается линейной, а сероводорода — уголковой, с валентным углом 90°.

Далее проанализированы формы электронных оболочек молекул щелочей и кислот — едкого натра, серной и азотной, синильной и соляной кислот. При этом показано, что молекула серной кислоты имеет тетраэдрическую форму, а азотной — плоскую треугольную.

Рассмотрены молекулы непредельных и предельных углеводородов. Изучены формы молекул аминокислот — аденина, тимина, цитозина и гуанина, а также энантиомерных молочных кислот.

Для примера рассмотрим схему строения молекулы бензола (рис. 2). Первая структурная формула молекулы бензола C_6H_6 была предложена Кекуле. Она представляла собой плоское шестиугольное кольцо из атомов углерода, связанных между собой попеременно одинарными и двойными связями. Недостатком этой модели является то, что при чередовании таких связей следовало ожидать неодинаковых расстояний между атомами углеро-

да, между тем все опыты свидетельствовали об одинаковых длинах этих связей. Тогда предположили, что существуют две структуры типа Кекуле, полученные поворотом одной из них на 60°, и три структуры типа Дьюара, у которых имелись две двойные связи по двум противоположным ребрам шестиугольника и одна параллельная им связь по большой диагонали шестиугольника. Было предположено, что молекула бензола представляет собой суперпозицию из всех этих пяти структур.

Построить модель бензола из тетраэдрических углеродных атомов Вант-Гофа не удалось — она получалась не плоской, а гофрированной. Лучшие результаты были при построении молекулы из шести тригональных sp^2-гибридизированных оболочек углеродных атомов с валентными углами 120°. Сгустки электронных оболочек своими концами перекрывают друг друга, образуя σ-связи. Такими же связями они перекрываются со сферически-симметричными оболочками водорода. Кроме того, считается, что перпендикулярно к плоскости молекулы располагаются 12 сгустков электронных оболочек для *p*-электронов, но на них остается только 6 электронов.

На рис. 2, *г* показана модель из деталей фирмы Коурталд. Каждый тригональный атом углерода изображен в виде треугольной призмы, а атом водорода — в виде усеченного шара. Модель бензола из усеченных шаров Стьюарта показана на рис. 2, *д*, а предлагаемая нами модель — на рис. 2, *е*. 12 двухэлектронных тороидов образуют шестиугольное кольцо, связывающее атомы углерода. Ядра водорода затягиваются в центры тороидов, расположенных по периферии молекулы. Правые и левые атомы чередуются через один, поэтому магнитные силовые линии идут так, как показано на чертеже. Остальные 6 электронов занимают 50% стыков между тороидами попарно над и под тремя атомами углерода из шести. В этом случае все шесть связей между атомами углерода получаются эквивалентными, но направленными в противоположные стороны.

Предположение о размещении неспаренных электронов по одному у каждого атома неприемлемо, так как при этом молекула не могла бы остаться плоской.

В моменты прохода электронов в тороидах через плоскость чертежа неспаренные электроны смогут беспрепятственно переходить в вакантные стыки тороидов смежных атомов.

Из-за наличия оси симметрии, перпендикулярной к плоскости чертежа, молекула бензола не должна обладать полярными свойствами. Все описанные особенности молекулы бензола, вытекающие из ее строения, хорошо согласуются с опытными данными.

РЕЗЮМЕ

Обобщая все изложенное в разделе IV, необходимо отметить следующее.

1. Зная формы электронных оболочек отдельных атомов, можно теоретически построить формы получающихся из них молекул и предсказать ряд их свойств, придерживаясь следующего порядка:

а) подсчитать числа валентных электронов с минимальными потенциалами ионизации в составляющих молекулу атомах и их общее число. Сопоставляя электроотрицательности атомов и их сродство к электрону, определить, сколько электронов может быть ими отдано и сколько приобретено, а также сколько может быть в молекуле двухэлектронных тороидов и неспаренных электронов;

б) установить формы гибридизированных электронных оболочек катионов и анионов, входящих в молекулу. Обычно ионы стремятся принять симметричную форму электронной оболочки инертного газа: катионы — предыдущего, а анионы данного периода. Для вставных декад характерно стремление атомов иметь замкнутую электронную оболочку типа никеля, палладия или платины. Катионы получаются более мелкими, а анионы — более крупными, чем нейтральные атомы;

в) исходя из структурной формулы молекулы, произвести возможно более плотную и симметричную упаковку ионов так, чтобы совпадали элементы симметрии (оси или плоскости симметрии) составляющих молекулу ионов и молекулы в целом. Такое построение следует проводить как для ионных, так и для ковалентных соединений. Катионы стремятся окружить себя анионами, а анионы — катионами. Получающиеся координационные числа должны соответствовать кратности соответствующих элементов симметрии для каждой данной формы оболочки составляющих молекулу ионов. Если число ионов меньше этой кратности, то симметрия молекулы в целом понижается;

г) сделать заключение о конфигурации молекулы, валентных углах, изоморфизме, предельности или непредельности (замкнутости или незамкнутости оболочек), ионном или ковалентном характере связей, полярности (асимметричности) и магнитных свойствах молекул и сопоставить их с опытными данными.

2. Для элементов первого и второго периодов таблицы Менделеева связь между смежными атомами обычно осуществляется через расположенный между ними двухэлектронный тороид. При ковалентной связи тороид располагается посередине между атомами, а при ионной — смещен к одному из них.

В предельных соединениях электронные оболочки всех атомов замкнуты. В непредельных (ненасыщенных) соединениях оболочки атомов с меньшим сродством к электрону могут остаться незамкнутыми. Нехватка двух электронов соответствует двойной связи, а недостаток четырех — тройной. Можно также определить, сколько электронов одного атома пошло на заполнение электронной оболочки другого; это число тоже будет определять порядок связи.

3. Взаимное расположение оболочек атомов в молекуле зависит в основном от электрических и магнитных взаимодействий с ближайшими соседями. Отталкивание одноименных и притяжение разноименных зарядов приводит к принципу минимальной взаимной экранировки и плотной упаковке электронных оболочек вокруг ядер. Этот принцип действует не только для отдельных атомов, но и для построенных из них молекул. Магнитные взаимодействия характерны стремлением к укорочению длины магнитных силовых линий. Это позволяет определять углы поворота одной отдельной части молекулы относительно другой.

Если смотреть на каждый атом снаружи, то электроны в тороидах смежных ковалентных атомов обычно вращаются в противоположные стороны и магнитные силовые линии направлены из центров тороидов одного атома в центры тороидов соседних. Это ведет к зеркальной симметрии смежных атомов. Для соседних атомов с одинаковыми направлениями вращения электронов в тороидах магнитные силовые линии идут из центров тороидов одного атома к стыкам тороидов другого атома, что вызывает появление центра инверсии между ними.

4. Двухэлектронные тороиды соответствуют σ-связям, а неспаренные электроны, имеющие возможность перемещаться от одного вакантного места в электронной оболочке молекулы к другому, соответствуют π-связям между атомами с незамкнутыми электронными оболочками. При этом на каждый сгусток электронного облака π-связи приходится по половине электрона. Это указывает на то, что неспаренный электрон 50% времени находится возле одного из атомов молекулы, а 50% — возле другого. В каждый момент молекула может не иметь плоскости симметрии между двумя смежными атомами, но при усреднении во времени за счет этого колебания π-электронов она становится симметричной.

   При построении гибридизированных орбиталей в молекулах не следует ограничиваться учетом только угловой части волновой функции, а обязательно принимать в расчет и радиальную ее составляющую, не забывать про угловую и радиальную составляющие дифференциала объема молекулы, в котором рассматривается электронное облако вероятности.
5. Плоскости расположения и средние линии тороидов соответствуют плоскостям усеченных шаров и окружностям их пересечения с шарами в моделях Стьюарта. Неспаренные электроны в этих молекулах отражения не находят
6. На весьма многочисленных примерах построения тороидальных моделей электронных оболочек молекул, небольшая часть которых была описана, удалось показать, что форма молекул, направления валентных связей, ионность или ковалентность этих связей, предельность или непредельность молекул, полиморфизм, наличие или отсутствие у них полярности и магнитного момента могут быть предсказаны или рационально объяснены и хорошо согласуются с опытными данными. Это является дополнительным подтверждением правильности отражения в формах электронных фигур объективно существующих свойств электронных оболочек атомов, из которых построены молекулы.

Литература

1. *А. С. Поваренных.* О рационализации и унификации кристаллохимических формул минералов.— В кн. «Химический состав и внутреннее строение минералов». Киев, «Наукова думка», 1964.
2. *И. С. Иоффе.* Органическая химия. М., Госхимиздат, 1953.
3. *П. Каррер.* Курс органической химии. Л., Госхимиздат, 1962.
4. *Л. Физер, М. Физер.* Органическая химия. Углубленный курс, т. I и II. М., «Химия», 1966.
5. *А. П. Терентьев, В. М. Потапов.* Основы стереохимии. Л., «Химия», 1954.
6. *Gilbert N. Lewis.* The atom and molecule.— J. Amer. Chem. Soc., 1916, N 4, 38.
7. *И. Ленгмюир.* Расположение электронов в атомах и молекулах. Л., «Академия», 1925.
8. *О. А. Осипов, В. И. Минкин.* Справочник по дипольным моментам. М., «Высшая школа», 1964.
9. *R. T. Sanderson.* Chemical periodicity. N. Y., Reinhold Publ. Copr.; London, Chapman and Hall, 1960.
10. *А. И. Китайгородский.* Органическая кристаллохимия. М., Изд-во АН СССР, 1955.
11. Models atomic Courtald. Griffin and George. Catalogue. International Edition. 1965.
12. *Ч. Коулсон.* Валентность. М., «Мир», 1965.
13. *Ф. Коттон, Дж. Уилкинсон.* Современная неорганическая химия, ч. 1, 2, 3. М., «Мир», 1969.
14. *Г. Грей.* Электроны и химическая связь. М., «Мир», 1967.
15. *М. В. Базилевский.* Метод молекулярных орбит и реакционная способность органических молекул. М., «Химия», 1969.
16. *М. Дьюар.* Теория молекулярных орбиталей в органической химии. М., «Мир», 1972.
17. *М. Грин.* Металлоорганические соединения переходных элементов. М., «Мир», 1972.

V. СТРОЕНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ ОБОЛОЧЕК В КРИСТАЛЛАХ

Глава 1

СОСТОЯНИЕ ВОПРОСА

Первоначально геометрическая кристаллография изучала только внешние формы кристаллов [1—3]. В реальных кристаллах величина и форма их граней могут изменяться. Однако углы между гранями и ребрами подчиняются закону постоянства углов, установленному в результате работ Стено, Ломоносова и Роме де Л'Иля. Согласно этому закону, углы между соответственными гранями и ребрами во всех кристаллах одного и того же вещества (точнее, одной и той же его полиморфной модификации при одинаковых условиях) постоянны.

Изучая углы между нормалями к граням кристаллов, ученые заметили их взаимное симметричное расположение относительно следующих элементов симметрии: центра инверсии C, осей симметрии L (поворотных и зеркально-поворотных) и плоскостей симметрии P (плоскостей зеркального отражения). Порядок оси симметрии показывает, какую долю от 360° составляет угол ее поворота. Различают двойные, тройные, четверные и шестерные оси симметрии:

Ось симметрии	Угол поворота	Ось симметрии	Угол поворота
L^2	180°	L^4	90°
L^3	120°	L^6	60°

Одинарную ось симметрии с углом поворота 360° обычно не рассматривают, так как она аналогична повороту на 0°. Пятерные оси симметрии в кристаллографии отсутствуют, хотя пятиугольная форма граней встречается в ряде кристаллов. Такие оси симметрии имеют место только в живой природе (например, морская звезда).

Для изображения пространственного расположения элементов симметрии и символов граней кристаллов на плоскости чертежа обычно используются стереографические проекции и сетка Вульфа.

Вейс и Моос разделили все симметричные фигуры на семь совокупностей углов или сингоний.

Полная совокупность элементов симметрии называется видом симметрии. Гессель и Гадолин теоретически доказали, что возможно существование только 32 видов симметрии кристаллов (табл. 29). В этой же таблице указаны также соответствующие элементы симметрии.

Все сингонии были разделены на три категории: низшую, среднюю и высшую. В низшей встречаются только оси симметрии порядка не выше второго. В средней имеется только одна ось высшего порядка, в высшей — несколько осей.

Митчерлих открыл явление полиморфизма, т. е. разницы симметрии кристаллов при одинаковом их химической составе, и изоморфизма, или идентичности форм строения кристаллов разного химического состава.

Таблица 29

Виды симметрии

Категория	Сингония	Примитивный	Центральный	Планальный	Аксиальный
Низшая	Триклинная	L^1	C	—	—
	Моноклинная	—	—	P	L^2
	Ромбическая	—	—	L^22P	$3L^2$
Средняя	Тригональная	L^3	L^3C	L^33P	L^33L^2
	Гексагональная	L^6	L^6PC	L^66P	L^66L^2
	Тетрагональная	L^4	L^4PC	L^44P	L^44L^2
Высшая	Кубическая	$4L^33L^2$	$4L^33L^23PC$	$4L^33L^46P$	$3L^44L^36L^2$

Таблица 29 (продолжение)

Категория	Сингония	Планаксиальный	Инверсионно-примитивный	Инверсионно-планальный
Низшая	Триклинная	—	—	—
	Моноклинная	L^2PC	—	—
	Ромбическая	$3L^23PC$	—	—
Средняя	Тригональная	L^33L^23PC	—	—
	Гексагональная	L^66L^27PC	L_6^3	$L_6^33L^23P$
	Тетрагональная	L^44L^25PC	L_4^2	$L_4^22L^22P$
Высшая	Кубическая	$3L^44L^36L^29PC$	—	—

Ученые не ограничились изучением только внешних форм кристаллов, а пришли к выводу, что внешняя симметрия является следствием симметрии их внутренней дискретной структуры. Так, Ломоносов предложил считать кристаллы упакованными из мельчайших шариков. Гаюи полагал, что кристаллы сложены из многогранных частиц различной формы. Он же открыл закон целочисленных отношений параметров кристаллов.

Браве, считая неизвестными формы составляющих кристаллы частиц, исследовал симметричное расположение их центров тяжести. Он теоретически вывел 14 типов пространственных решеток, составленных из повторяющихся элементарных параллелоэдров, и указал, что плоскости внешних граней кристаллов и плоскости спайности соответствуют наиболее плотным плоским сеткам решетки.

Параллелоэдры Браве различаются длинами ребер (a, b, c) и углами между ними (α, β, γ), а также примитивностью P или центрированием: базы C, объема I и граней F.

Элементарные параллелоэдры Браве изображены в аксонометрии на рис. 1, где указаны соотношения их ребер и углов и формулы элементов симметрии.

Все эти параллелоэдры могут быть получены путем деформации ребер и углов из наиболее симметричной фигуры — куба, для которого все ребра равны и перпендикулярны одно к другому.

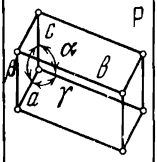
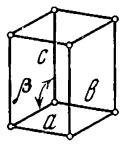
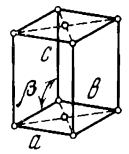
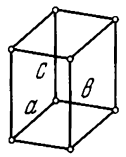
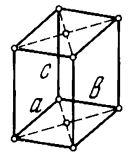
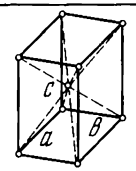
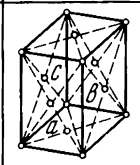
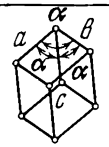
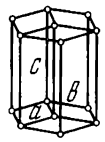
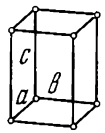
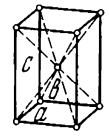
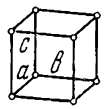
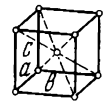
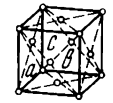
Сингония	Элементы симметрии	Примитивная	Базоцентрированная	Объемно-центрированная	Гранецентрированная
Триклинная $a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90°$	C		C	I	F
Моноклинная $a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90°$ $\beta \neq 90°$	L^2PC				
Ромбическая $a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90°$	$3L^23PC$				
Тригональная Ромбоэдрическая $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90°$	$L_6^3 3L^2 3PC$				
Гексагональная $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90°$ $\gamma = 120°$	L^66L^27PC				
Тетрагональная $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90°$	L^44L^25PC				
Кубическая $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90°$	$3L^44L^36L^29PC$				

Рис. 1. Решетки Браве

Если куб деформировать вдоль одной из четверных осей симметрии, то он превратится в тетрагональную призму; а если вдоль двух таких осей, но в разной степени, то — в ромбическую. Если тетрагональную призму деформировать вдоль диагонали ее основания так, чтобы оно превратилось в ромб с углом между ребрами 120°, то из трех таких параллелоэдров, повернутых один относительно другого на 120°, можно сложить гексагональную призму.

Проведя деформацию ромбической призмы так, чтобы ромб превратился в параллелограмм, получим моноклинный параллелоэдр. Наклонив его, найдем наименее симметричный триклинный параллелоэдр. Наконец, деформировав куб вдоль тройной оси симметрии, можно получить тригональный ромбоэдр.

При переходе от внешней симметрии кристаллов к симметрии кристаллических решеток ученым пришлось ввести еще ряд дополнительных элементов симметрии, а именно: трансляцию, или параллельный перенос, плоскости скользящего отражения и винтовые оси. Если оси внешней симметрии всегда пересекались в одной точке, то для кристаллических решеток они могут располагаться накрест, но не пересекаться.

Еще в 1885 г. Е. С. Федоров [4, 5] теоретически вывел 230 пространственных групп симметрии, или точечных групп кристаллических решеток, которые полностью исчерпывали все возможные варианты точечной симметрии [6—8 и др.]. Теория Е. С. Федорова была развита еще до открытия строения атомов и до появления рентгеновских лучей. Однако все ее предсказания блестяще оправдались.

Позже при изучении магнитных и некоторых других свойств веществ выяснилось, что федоровские точечные группы не исчерпывают некоторых особенностей строения кристаллов. Г. Хёшем в 1930 г. и независимо от него А. В. Шубниковым в 1951 г. [9] были выведены классы антисимметрии, которые сопровождались изменением знака свойства (например, изменением направления магнитного момента) или условно изменением цвета с черного на белый для конечной фигуры, обладающей симметрией данного класса.

Введение операций антисимметрии привело к удвоению элементарной ячейки вдоль одного, двух или трех ребер федоровской ячейки и к значительному увеличению числа черно-белых групп, в которых вместо не имеющих размеров точек был взят элементарный асимметричный тетраэдр. Полный вывод всех таких черно-белых групп, основанный на общей теории групп, был выполнен А. М. Заморзаевым, Н. В. Беловым, Н. Н. Нероновой и Т. С. Смирновой. Обобщенные группы кроме 32 видов симметрии содержат еще 58 черно-белых магнитных групп. Помимо 14 одноцветных решеток Браве появляются еще 22 черно-белые решетки. Всего была получена 1651 группа, в их число вошла 1191 черно-белая группа, а также 230 одноцветных и 230 «серых» федоровских групп, которые представляют собой результат применения операции антисимметрии к самосимметричной фигуре. Полный вывод всех таких групп имеется в справочнике [10].

Экспериментальная проверка всех теоретических представлений геометрической кристаллографии стала возможной только после разработки рентгеноструктурного и электронографического методов анализа [11—17]. Сначала использовался порошковый метод, дающий кольцевые дебаеграммы. Значительно больше информации о внутреннем строении кристаллов удалось получить на качающихся и вращающихся монокристаллах.

Первоначально рентгенограммы позволяли определять только вид симметрии кристалла и основные межплоскостные расстояния по различным кристаллографическим направлениям. Дальше использовался обычно метод проб и ошибок, т. е. задавались различными координатами атомов в пределах элементарной ячейки, а затем, пользуясь законами интерференции рентгеновских лучей, вычисляли интенсивности различных рефлексов до тех пор, пока не удавалось получить удовлетворительное согласие с опытными данными. Однако позже были разработаны методы определения координат атомов путем так называемого синтеза Паттерсона, позволившего рассчитать значительное число структур [18]. Сейчас вычисления по этому весьма трудоемкому методу удалось значительно ускорить путем использования ЭВМ.

В последнее время для исследования магнитной симметрии кристаллов стал применяться метод нейтронографии [19].

Использование синтеза Паттерсона при обработке данных об интенсивностях рефлексов при рентгено-, электроно- и нейтронографии позволяет строить изолинии электронной и спиновой плотности, которые дают некоторое сглаженное представление о форме электронных оболочек атомов и молекул в кристаллах. При этих расчетах атомы считаются сферически-симметричными, учитывается только радиальное распределение электронной плотности в атомах.

Ломоносов еще в 1749 г. представлял себе кристаллы состоящими из шарообразных, соприкасающихся «корпускул». Первые модели структуры из шаров разных диаметров на примере каменной соли NaCl были выполнены Барлоу и Попом в 1906—1907 гг. После этого кристаллические упаковки из шарообразных атомов были широко использованы в науке.

Рентгеноструктурный анализ давал возможность определять сумму ионных радиусов, но не позволял вычислить каждый из них в отдельности. Это удавалось сделать только для атомных радиусов элементов, где можно было просто делить межатомные расстояния пополам. Затем было сделано предположение о том, что для соединений с крупными анионами можно определять ионные радиусы анионов этим же приемом, а радиусы катионов рассчитывать, исходя из размеров остающихся между анионами тетраэдрических и октаэдрических пустот. Таким образом, В. М. Гольдшмидт в 1926 г. определил ионные радиусы значительного числа химических элементов. Эти данные затем уточнялись Паулингом, Г. Б. Бокием, Н. В. Беловым и др. [6, 20]. Однако все системы таких радиусов не являются аддитивными.

Согласно разработанной для анионов теории плотнейших упаковок, были получены два основных их типа: двухслойная *ABABAB*...— гексагональная и трехслойная *ABCABCABC*...— кубическая. При чередовании слоев *AB* и *ABC* были получены и другие многослойные упаковки, большинство которых было гексагональными. Путем заполнения малыми катионами части тетраэдрических и октаэдрических пустот между крупными анионами удалось получить весьма много кристаллографических групп симметрии.

Паулинг предложил соединять прямыми линиями центры анионов, окружающих катион, и получил координационный многогранник. Кристаллическая решетка составлялась путем набора таких многогранников с общими вершинами. Этот метод применяется сейчас при изображении сложных структур, например силикатов.

Формы координационных многогранников для редко встречающихся координационных чисел были определены Н. В. Беловым [6].

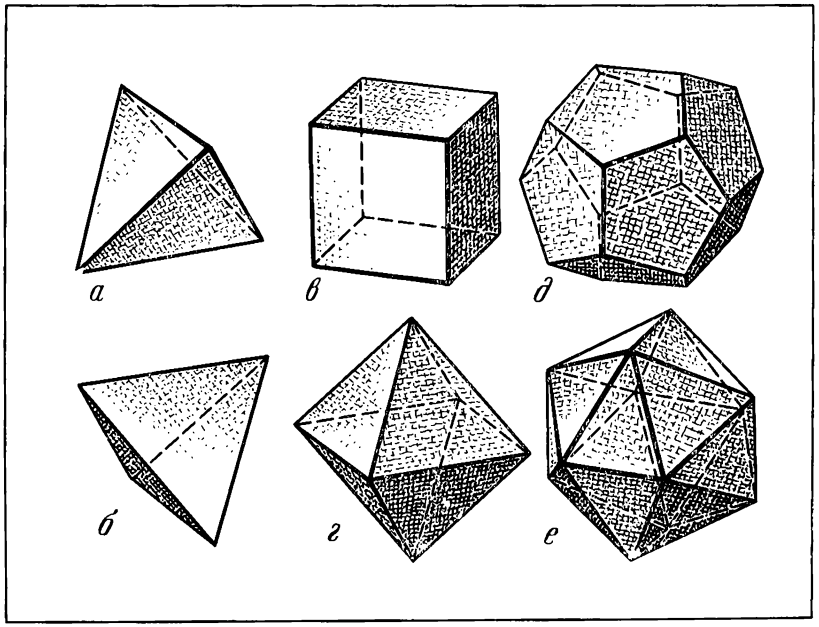


Рис. 2. Координационные многогранники

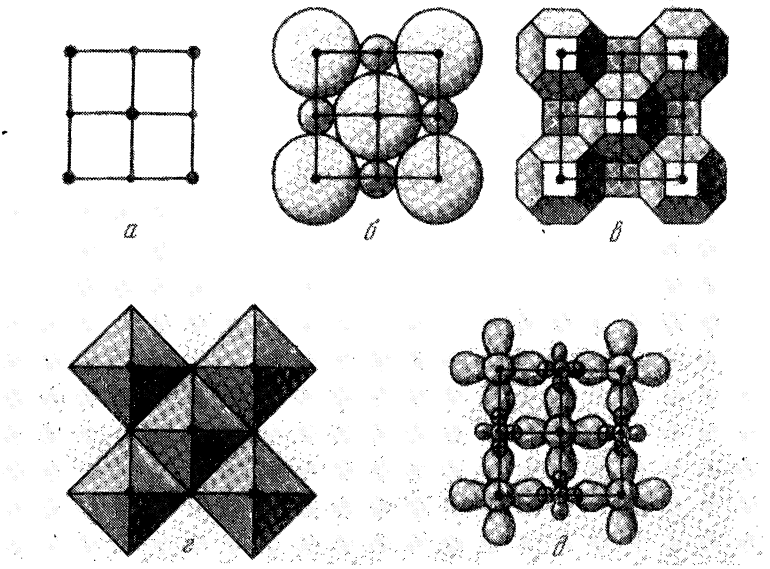


Рис. 3. Различные способы изображения кристаллической решетки каменной соли

Если соединить центральный атом прямыми линиями с ближайшими соседями, а затем провести нормальные к ним плоскости на расстояниях, равных ионным радиусам, то получится многогранник, каждая грань которого будет отвечать вершине, а вершина — грани координационного многогранника. Число ребер таких «обращенных» многогранников окажется одинаковым с координационными многогранниками, а расположены они будут накрест друг к другу.

Для правильных многогранников эти пары следующие: тетраэдр — тетраэдр (рис. 2, *а* и *б*), куб — октаэдр (рис. 2, *в* и *г*), пентагон-додекаэдр — икосаэдр (рис. 2, *д* и *е*). Аналогичным образом могут быть построены обращенные многогранники к координационным многогранникам Н. В. Белова. Так, треугольной призме будет отвечать треугольная дипирамида, томсоновскому (скрученному на 45°) кубу — тетрагональный скаленоэдр, кубооктаэдру — ромбододекаэдр и т. п. Такие многогранники будут до некоторой степени отражать форму атома или иона в данном окружении.

После 1960 г. в ряде работ при построении кристаллических решеток стали использовать схемы гибридизированных электронных облаков (атомных орбиталей), учитывающих только угловую часть волновой функции. При этом сначала обычными методами определяется расположение центров тяжести атомов, а затем из набора гибридизированных орбиталей выбирается вариант, подходящий по геометрии.

Для примера приведем описанные способы изображения грани (001) элементарной ячейки кристаллической решетки каменной соли NaCl: точечная схема (рис. 3, *а*); схема упаковки из шаров разного диаметра (рис. 3, *б*); схема упаковки из параллелоэдров: для натрия — кубы, для хлора — комбинация куба и октаэдра (рис. 3, *в*); схема из координационных многогранников вокруг ионов хлора в виде октаэдров (рис. 3, *г*); схема электронных облаков $2p^6$-электронов для ионов натрия и $3p^6$-электронов — для ионов хлора (рис. 3, *д*).

Из изложенного следует, что обычно исследователи ограничиваются эмпирическим определением пространственного расположения центров тяжести атомов и ионов, но вопрос о причинах такого расположения и о строении их электронных оболочек либо совсем опускается, либо же для предварительно определенной формы координационного многогранника подбирается подходящий вариант гибридизированных атомных орбиталей.

Ряд данных по строению и свойствам кристаллов и физике твердого тела можно почерпнуть в работах [21—31].

Литература

1. *Г. М. Попов, И. И. Шафрановский.* Кристаллография. М., Госгеолтехиздат, 1955.
2. *Е. Е. Флинт.* Практическое руководство по геометрической кристаллографии. М., Госгеолтехиздат, 1956.
3. *И. Костов.* Минералогия, М., «Мир», 1971.
4. *Е. С. Федоров.* Начала учения о фигурах. М., Изд-во АН СССР, 1953.
5. *И. И. Шафрановский.* Евграф Степанович Федоров. Л., Изд-во АН СССР, 1963.
6. *Г. Б. Бокий.* Введение в кристаллохимию. М., Изд-во МГУ, 1954.
7. *Г. Б. Бокий, М. А. Порай-Кошиц.* Рентгеноструктурный анализ, т. 1. М., Изд-во МГУ, 1964.
8. *Г. Б. Бокий.* Кристаллохимия. М., «Наука», 1971.
9. *А. В. Шубников.* Симметрия и антисимметрия конечных фигур. М., Изд-во АН СССР, 1951.

10. *В. А. Копцик.* Шубниковские группы. Справочник по симметрии и физическим свойствам кристаллических структур. М., Изд-во МГУ, 1966.
11. *Б. К. Вайнштейн.* Структурная электронография. М., Изд-во АН СССР, 1956.
12. *Н. А. Шишаков.* Основные понятия структурного анализа. М., Изд-во АН СССР, 1961.
13. *С. W. Bunn.* Chemical cristallography. An introduction to optical and X-Ray methods. Oxford, Clarendon Press, 1961.
14. *А. Гинье.* Основные понятия структурного анализа. Теория и практика. М., Физматгиз, 1961.
15. *Б. Я. Пинес.* Лекции по структурному анализу. Харьков, Изд-во Харьковск. ун-та, 1967.
16. *Б. Б. Звягин.* Электронография и структурная кристаллография глинистых минералов. М., «Наука», 1964.
17. *Г. Липсон, Г. Стипп.* Интерпретация порошковых рентгенограмм. М., «Мир», 1972.
18. *М. Бюргер.* Структура кристаллов и векторное пространство. ИЛ, 1961.
19. *Ю. А. Изюмов, Р. П. Озеров.* Магнитная нейтронография. М., «Наука», 1966.
20. *Н. В. Белов.* Структура ионных кристаллов и металлических фаз. М., Изд-во АН СССР, 1947.
21. *А. R. von Hippel.* Molecular science and molecular engineering. N. Y., John Wiley and Sons; London, Chapman and Hall. 1959.
22. *Г. С. Жданов.* Физика твердого тела. М., Изд-во МГУ, 1961.
23. *Ч. Киттель.* Элементарная физика твердого тела. М., «Наука», 1965.
24. *И. Костов.* Кристаллография. М., «Мир», 1965.
25. *А. С. Поваренных.* Кристаллохимическая классификация минеральных видов. Киев, «Наукова думка», 1966.
26. *Д. П. Григорьев.* Основы конституции минералов. М., «Недра», 1966.
27. *W. G. Moffat, G. W. Pearsall, J. Wulff.* The Structure and Properties of Materials., v. 1. Structure. John Willey and Sons. New York — London — Sydney. 1967.
28. *Ч. Киттель.* Квантовая теория твердых тел. М., «Наука», 1967.
29. *H. Krebs.* Grundzuge der Anorganischen Kristallochemie. Ferdinand Enke Verlag. Stuttgart. 1968.
30. *Ч. Уэрт, Р. Томсон.* Физика твердого тела. М., «Мир», 1969.
31. *Г. Шульце.* Металлофизика. М., «Мир», 1971.

Глава 2

СТРОЕНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ ОБОЛОЧЕК В КРИСТАЛЛАХ ЭЛЕМЕНТОВ

Полиморфизм кристаллов элементов

В табл. 30 приведена сводка данных [1—5] о свойствах кристаллов элементов.

Все элементы расположены в порядке возрастания их атомных номеров Z. Границы рядов таблицы Менделеева отмечены пунктиром, а границы периодов — сдвоенной линией. Использованы следующие обозначения [1, 2, 6]:

А—1. Гранецентрированная плотнейшая кубическая (типа меди).
А—2. Объемно-центрированная кубическая (типа α-вольфрама).
А—3. Гексагональная плотнейшая (типа магния).
А—4. Кубическая (типа алмаза).
А—5. Тетрагональная (типа белого олова).
А—6. Тетрагональная объемно-центрированная (типа индия).
А—7. Ромбоэдрическая (типа серого мышьяка).

Таблица 30

Кристаллическое строение элементов

Z	Элемент	Полиморфная модификация	Структурный тип	Периоды решетки, Å				Температура, °C	Плотность γ, г/см³
				a	b	c	α°		
1	H		Тетр.	4,42	4,42	3,75			
			Гекс.	3,75	3,75	6,49		—271	0,08988·10⁻³
2	He		A — 3	3,57	3,57	5,83		—271	0,1785·10⁻³
3	Li	α	A — 2	3,509	3,509	3,509			0,531—0,534
		β	A — 3	3,111	3,111	5,093		—195	
		γ	A — 1	4,36—4,43	4,36—4,43	4,36—4,43		—195	
4	Be	α	A — 3	2,286	2,286	3,584			1,845—1,86
		β	Гекс.	7,1	7,1	10,8		500—700	
		γ	A — 2	2,549	2,549	2,549		1250	
5	B		Тетр.	8,73	8,73	5,03			2,32—2,34
			Гекс.	4,908	4,908	12,567			
6	C		A — 4	3,567	3,567	3,567			3,51
		α	A — 9	2,4612	2,4612	6,708			2,22—2,25
		β	Ромбоэдр.	2,4612	2,4612	10,062			
7	N	α	Куб.	5,664	5,664	5,664		—269	1,25·10⁻³
		β	Гекс.	4,039	4,039	6,670		—238	
8	O	α	Ромб.	5,50	3,82	3,44		—252	1,25·10⁻³
		β	Ромбоэдр.	6,19	6,19	6,19	99°1′	—238	
				3,307	3,307	11,256			
		γ	Куб.	6,83	6,83	6,83		—223	
9	F		Куб.	6,67	6,67	6,67		—218	1,696·10⁻³
10	Ne		A — 1	4,429	4,429	4,429		—269	0,90·10⁻³
11	Na		A — 2	4,291	4,291	4,291			0,97
			A — 3	3,767	3,767	6,154		—268	
12	Mg		A — 3	3,209	3,209	5,210			1,74—1,75

Таблица 30 (продолжение)

Z	Элемент	Полиморфная модификация	Структурный тип	Периоды решетки, Å				Температура, °C	Плотность γ, г/см³
				a	b	c	α°		
13	Al		A — 1	4,049	4,049	4,049			2,70
14	Si		A — 4	5,430	5,430	5,430			2,20—2,49
15	P		Куб.	18,8	18,8	18,8			2,11
			Куб. (красный)	11,1	11,1	11,1			2,20—2,25
			Куб. (белый)	7,18	7,18	7,18		—35	1,825
			A — 16 (черный)	3,32	4,39	10,52			2,69—2,70
16	S	α	A — 17	10,437	12,845	24,369			
		β	Монокл.	10,92	10,98	11,04	83°16′		1,96
		γ	Ромбоэдр.	6,46	6,46	6,46	115°18′		2,07
17	Cl		Ромб.	6,24	8,26	4,48		—160	$3{,}21 \cdot 10^{-3}$
18	Ar		A — 1	5,256	5,256	5,256		—269	$1{,}784 \cdot 10^{-3}$
19	K		A — 2	5,32	5,32	5,32			0,86—0,87
20	Ca	α	A — 1	5,582	5,582	5,582			1,54—1,55
		β	A — 3	3,94	3,94	6,44			
		γ	A — 2	4,477	4,477	4,477		500	
21	Sc	α	A — 3	3,308	3,308	5,265			2,500—3,10
		β	A — 1	4,532	4,532	4,532			
22	Ti	α	A — 3	2,950	2,950	4,678			4,27—4,54
		β	A — 2	3,307	3,307	3,307		900	
23	V		A — 2	3,028	3,028	3,028			5,60—6,11
24	Cr		A — 2	2,884	2,884	2,884			6,92—7,19
25	Mn	α	A — 12	8,914	8,914	8,914			7,20—7,4
		β	A — 13	6,470	6,470	6,470		750	
		γ	A — 1	3,862	3,862	3,862		1095	
		δ	A — 2	3,081	3,081	3,081		1134	

Таблица 30 (продолжение)

Z	Элемент	Полиморфная модификация	Структурный тип	Периоды решетки, Å				Температура, °C	Плотность γ, г/см³
				a	b	c	α^0		
26	Fe	α	A — 2	2,866	2,866	2,866			7,6—7,9
		β	A — 2	2,9043	2,9043	2,9043		770	
		γ	A — 1	3,647	3,647	3,647		916	
		δ	A — 2	2,932	2,932	2,932		1390	
27	Co	α	A — 3	2,507	2,507	4,069			8,7—8,9
		β	A — 1	3,544	3,544	3,544			
28	Ni		A — 1	3,524	3,524	3,524			8,35—8,9
29	Cu		A — 1	3,615	3,615	3,615			8,3—8,95
30	Zn		A — 3	2,665	2,665	4,947			7,11—7,14
31	Ga		Ромб.	4,520	7,661	4,526			5,9—6,1
32	Ge		A — 4	5,657	5,657	5,657			5,32—5,50
33	As		A — 7	3,760	3,760	10,548	54°10′		5,73—5,75
34	Se		A — 8	4,364	4,364	4,958			4,8
		α	Монокл.	12,85	8,07	9,31	93°08′		4,46
		β	Монокл.	9,05	9,07	11,61	90°46′		
35	Br		Ромб.	6,67	8,72	4,48		—150	3,12 (ж)
36	Kr		A — 1	5,721	5,721	5,721		—215	$3{,}74 \cdot 10^{-3}$
37	Rb		A — 2	5,70	5,70	5,70			1,52—1,53
38	Sr	α	A — 1	6,085	6,085	6,085			2,56—2,63
		β	A — 3	4,32	4,32	7,06		248	
		γ	A — 2	4,85	4,85	4,85		614	
39	Y	α	A — 3	3,645	3,645	5,730			4,47
		β	A — 2	4,11	4,11	4,11			
40	Zr	α	A — 3	3,231	3,231	5,147			6,49—6,53
		β	A — 2	3,609	3,609	3,609		862	

Таблица 30 (продолжение)

Z	Элемент	Полиморфная модификация	Структурный тип	Периоды решетки, Å				Температура, °С	Плотность γ, г/см³
				a	b	c	α°		
41	Nb		A — 1	3,301	3,301	3,301			8,4—8,7
42	Mo		A — 2	3,147	3,147	3,147			10,1—10,4
43	Tc		A — 3	2,735	2,735	4,388			11,45—11,50
44	Ru		A — 3	2,706	2,706	4,282			11,51—12,28
45	Rh		A — 1	3,804	3,804	3,804			12,41
46	Pd		A — 1	3,890	3,890	3,890			11,4—12,2
47	Ag		A — 1	4,086	4,086	4,086			10,5—10,6
48	Cd		A — 3	2,979	2,979	5,617			8,60—8,65
49	In		A — 6	3,251	3,251	4,947			7,25—7,31
50	Sn	α β	A — 4 A — 5	6,489 5,831	6,489 5,831	6,489 3,181'		 25	5,85 7,2—7,5
51	Sb		A — 7	4,307	4,307	11,273			5,3—6,69
52	Te		A — 8	4,4566	4,4566	5,9268			6,20—6,25
53	J		Ромб.	7,270	9,793	4,790			4,93—4,94
54	Xe		A — 1	6,197	6,197	6,197		—215	$5{,}89 \cdot 10^{-3}$
55	Cs		A — 2	6,14	6,14	6,14		—10	1,87—1,90
56	Ba		A — 2	5,025	5,025	5,025			3,5—3,8
57	La	α β γ	Гекс. A — 1 A — 2	3,770 5,304 4,26	3,770 5,304 4,26	12,159 5,304 4,26			6,12—6,20
58	Ce	α β γ	A — 1 A — 3 A — 1	4,85 3,65 5,161	4,85 3,65 5,161	4,85 5,91 5,161		—189	 6,77—6,88

Таблица 30 (продолжение)

Z	Элемент	Полиморфная модификация	Структурный тип	Периоды решетки, Å				Температура, °С	Плотность γ, г/см³
				a	b	c	α°		
59	Pr	α β	Гекс. A — 2	3,672 4,13	3,672 4,13	11,835 4,13			6,47—6,78
60	Nd	α β	Гекс. A — 2	3,658 4,13	3,658 4,13	11,799 4,13			6,96—7,01
61	Pm								7,26
62	Sm	α β	Гекс. A — 2	3,621 4,07	3,621 4,07	26,25 4,07			7,54—7,75
63	Eu		A — 2	4,582	4,582	4,582			5,26—5,30
64	Gd	α β	Гекс. A — 2	3,636 4,06	3,636 4,06	5,782 4,06			7,89—7,90
65	Tb		A — 3	3,601	3,601	5,693			8,27—8,30
66	Dy		A — 3	3,590	3,590	5,647			8,50—8,54
67	Ho		A —	3,577	3,577	5,616			8,8
68	Er		A — 3	3,559	3,559	5,587			9,05—9,16
69	Tm		A — 3	3,537	3,537	5,554			9,30—9,33
70	Yb	α β	A — 1 A — 2	5,486 4,45	5,486 4,45	5,486 4,45			6,97—7,00
71	Lu		A — 3	3,503	3,503	5,551			9,84—9,85
72	Hf	α β	A — 3 A — 2	3,195 3,52	3,195 3,52	5,058 3,52			13,07—13,31
73	Ta		A — 2	3,303	3,303	3,303			16,2—16,6
74	W		A — 2	3,165	3,165	3,165			19,1—19,3
75	Re		A — 3	2,760	2,760	4,450			20,5—21,4

Таблица 30 (продолжение)

Z	Элемент	Полиморфная модификация	Структурный тип	Периоды решетки, Å				Температура, °С	Плотность γ, г/см³
				a	b	c	α^0		
76	Os		A — 3	2,735	2,735	4,319			22,48—22,60
77	Ir		A — 1	3,8312	3,8312	3,8312			22,42—22,50
78	Pt		A — 1	3,923	3,923	3,923			21,3—21,6
79	Au		A — 1	4,078	4,078	4,078			19,3—19,5
80	Hg		A — 10	3,005	3,005	3,005	70°31′	—46	13,54—13,60
81	Tl	α β	A — 3 A — 2	3,456 3,882	3,456 3,882	5,525 3,882		 262	11,85 11,86—11,87
82	Pb		A — 1	4,950	4,950	4,950			11,25—11,94
83	Bi		A — 7	4,7459	4,7459	4,7459	57°14′		9,78—9,84
84	Po		Куб. Ромбоэдр.	3,345 3,36	3,345 3,36	3,345 3,36	 98°13′	10 75	9,32—9,50
85	At								
86	Rn		A — 1	6,3	6,3	6,3			$9{,}73 \cdot 10^{-3}$
87	Fr		A — 2	6,67	6,67	6,67			2,4—2,5
88	Ra		A — 2						5,0—6,0
89	Ac		A — 1	5,311	5,311	5,311			10,7
90	Th	α β	A — 1 A — 2	5,084 4,11	5,084 4,11	5,084 4,11	 	 1450	11,2—11,7
91	Pa		Тетр.	3,92	3,92	3,24			15,37
92	U	α β γ	A — 20 Тетр. A — 2	2,858 10,759 3,534	5,877 10,759 3,534	4,945 5,656 3,534	 	25 720 800	18,7—19,6

Таблица 30 (окончание)

Z	Элемент	Полиморфная модификация	Структурный тип	Периоды решетки, Å				Температура, °С	Плотность γ, г/см³
				a	b	c	α^0		
93	Np	α	Ромб.	4,723	4,887	6,663		20	19,5
		β	Тетр.	4,897	4,897	3,388		313	
		γ	A — 2	3,52	3,52	3,52		600	
94	Pu	α	Монокл.	6,183	4,824	10,973	101°48′	21	19,8
		β	Монокл.	9,284	10,463	7,859	92°08′	190	
		γ	Ромбич.	3,158	5,768	10,162		236	
		δ	A — 1	4,637	4,637	4,637		320	
		δ′	Тетр.	4,701	4,701	4,489		465	
		ε	A — 2	3,636	3,636	3,636		490	
95	Am		A — 1	4,894	4,894	4,894			11,7
			Гекс.	3,642	3,642	11,76			
96	Cm		Гекс.	3,496	3,496	11,331			

A—8. Гексагональная (типа серого селена).
A—9. Гексагональная (типа α-графита).
A—10. Ромбоэдрическая (типа ртути).
A—11. Ромбическая (типа галлия).
A—12. Кубическая (типа α-марганца).
A—13. Кубическая (типа β-марганца).
A—14. Ромбическая (типа йода).
A—15. Кубическая (типа β-вольфрама).
A—16. Ромбическая (типа черного фосфора).
A—17. Ромбическая (типа α-серы).
A—18. Тетрагональная (типа β-урана).
A—19. Кубическая примитивная (типа α-полония).
A—20. Ромбическая (типа α-урана).

Величины углов α и β указываются только в том случае, если они отличаются от 90 и 60°.

Судя по данным табл. 30, полиморфизм элементов широко распространен. Одна треть элементов кристаллизуется в двух или более полиморфных модификациях. Для указанных 96 элементов общее число известных полиморфных модификаций составляет около 160.

Подавляющее число элементов кристаллизуется в кубической (A—1 и A—2) или гексагональной (A—3) сингониях. Прочие типы решеток встречаются относительно редко. Триклинная сингония вообще не встречается среди кристаллов элементов. Данные о плотности полиморфных модификаций относятся к тем агрегатным состояниям, в которых они существуют в лабораторных условиях.

Более подробные сведения о свойствах кристаллов элементов можно найти в [1—12].

Литература

1. Internationale Tabellen zur Bestimmung von Kristallen. Berlin, 1935.
2. International Tables for X-Ray Cristallography. N. F. Henry K. Losdale (Ed.). Birmingam, 1952.
3. *В. Самсонов.* Справочник по физико-химическим свойствам элементов и металлов. Киев. «Наукова думка», 1965.
4. Справочник химика, т. 1. М., Госхимиздат, 1969.
5. *Е. П. Субботина.* Сборник физических констант и параметров. Л., Изд-во ЛГУ, 1967.
6. *Г. Шульце.* Металлофизика. М., «Мир», 1971.
7. *У. Мазон.* Физическая акустика, т. III. Динамика решетки. М., «Мир», 1968.
8. *А. А. Иванько.* Твердость. Справочник. Киев, «Наукова думка», 1968.
9. Термические константы неорганических веществ. М.— Л., Изд-во АН СССР.
10. *Р. Б. Котельников, С. Н. Башлыков, З. Г. Галикбаров, А. И. Каштанов.* Особо тугоплавкие элементы и соединения. Справочник. М., «Металлургия», 1969.
11. *М. Х. Карапетянц, М. Л. Карапетянц.* Основные термодинамические константы неорганических и органических веществ. М., «Химия», 1968.
12. *Н. В. Мельников, В. В. Ржевский, М. М. Протодьяконов.* Справочник по физическим свойствам горных пород. М., «Недра», 1975.

Строение кристаллов и анизотропия элементарных частиц

Как было показано, в первом разделе книги из теории фундаментального поля следует, что элементарные частицы обладают резкой анизотропией поля, которая достигает максимума на мгновенной оси вращения частицы. При прецессии каждой частицы эта ось описывает во втором подпространстве конус, на поверхности которого напряженность поля достигает максимума, а на оси прецессии и особенно в перпендикулярной к ней экваториальной плоскости — минимума.

Для протона угол прецессии составляет 17°28′, а для электрона — 22°18′. Рассматривая во втором разделе строение и симметрию ядер, мы нашли, что вследствие анизотропии и прецессии ядра приобретают симметричное строение, в основном кубической и гексагональной сингонии. При этом оси конусов прецессии отдельных протонов располагаются симметричными группами параллельно осям симметрии ядра в целом.

Для кубических ядер такими осями являются три четверные L^4, идущие из центра ядра к центрам граней куба, т. е. перпендикулярно одна к другой; четыре тройные L^3, идущие из центра куба к его углам или ориентированные под тетраэдрическими углами одна к другой, а также шесть двойных осей симметрии L^2, направленных из центра куба к серединам ребер куба под углами 60 и 90° одна к другой. Для гексагональных ядер такими осями будут одна тройная L^3 и три двойные L^2, перпендикулярные к ней и идущие под углами 120° одна к другой.

Расстояния между параллельными осями протонов в ядре будут порядка размеров ядра, т. е. 10^{-13}, 10^{-14} *см*. Радиусы электронных оболочек составляют величины порядка 10^{-8} *см*, т. е. на пять-шесть порядков больше. Поэтому пересечение каждой группы параллельных конусов анизотропии с поверхностью такой сферы для электронов дает несколько практически сливающихся окружностей.

Рассмотрев вероятные формы электронных оболочек атомов, мы нашли, что они представляют собой тороиды, оси симметрии которых направлены так же, как и оси конусов анизотропии ядер. Таким образом, симметрия ядер оказалась тесно связанной с симметрией электронных оболочек атомов.

Проверим, имеется ли связь между симметрией ядер и электронных оболочек с симметрией кристаллов. Сделаем это на примере наиболее распространенных плотнейших кубических и гексагональных элементарных ячеек.

На рис. 4 изображено диагональное сечение нескольких смежных элементарных ячеек для плотнейшей кубической упаковки. Принимая ребро ячейки за единицу, получим, что ширина по горизонтали будет равна $\sqrt{2}$. Для каждой такой ячейки характерными являются точки по углам и в центрах граней, где располагаются остовы атомов, ядра которых обозначим черными кружками, а также центры тетраэдрических (наполовину зачерненные) и октаэдрических (белые кружки) пустот между ними.

В диагональной плоскости элементарной ячейки, совпадающей с плоскостью чертежа, четверные оси симметрии L^4 идут вертикально, тройные L^3 — диагонально и двойные L^2 — горизонтально. Совместив с этими осями симметрии оси конусов анизотропии, получим, что конусы будут пересекаться с плоскостью чертежа по образующим прямым линиям, составляющим с этими осями углы 17°28′ для протонных и 22°18′ для электронных конусов.

Рассматривая получившиеся схемы, легко заметить, что образующие конусов анизотропии точно проходят через ряд точек соседних ячеек. Точек этих довольно много, и они лежат не слишком далеко одна от другой.

Так как для кубической ячейки размеры пространственной диагонали, диагонали грани и ребра куба относятся как $\sqrt{3}:\sqrt{2}:\sqrt{1}$, возникает возможность чисто тригонометрическим путем рассчитать тангенсы углов анизотропии для протонного и электронного конусов. Они оказались следующими: для протона $\operatorname{tg}\gamma = \frac{2\sqrt{2}}{9} = 0{,}314270$, $\gamma = 17°27'$; для электрона $\operatorname{tg}\gamma = \frac{2\sqrt{2}}{7} = 0{,}404061$, $\gamma = 22°00'$.

Как видим, для протонного конуса разница углов составляет всего 1 *мин*, а для электронного — 0°18′. Точность получилась вполне хорошей.

На рис. 5 дан диагональный разрез для ряда элементарных ячеек при плотнейшей гексагональной упаковке. Если ребро такой ячейки принять за единицу, то ее высота составит $2\sqrt{2/3}$, а горизонтальный размер $\sqrt{3}$. Для каждой ячейки характерными являются точки по ее углам и в средней по высоте плоскости, где размещаются ядра атомов (черные кружки), а также центры двух октаэдрических (белые кружки) и четырех тетраэдрических (наполовину зачерненные кружки) пустот.

В плоскости чертежа тройные оси симметрии L^3 идут вертикально, а двойные L^2 — горизонтально. Кроме того, для каждой октаэдрической и тетраэдрической пустоты можно провести тройные и двойные оси симметрии ближнего порядка. Тангенсы углов наклона этих осей к горизонтали составляют для тройных осей $\operatorname{tg}\gamma = \sqrt{2}/4$ и для двойных $\operatorname{tg}\gamma = \sqrt{2}/2$.

Проведя относительно всех этих осей симметрии протонные и электронные конусы анизотропии, заметим, что для вертикальных тройных осей протонные конусы анизотропии проходят через центры тетраэдрических пустот смежных по вертикали ячеек, а электронные конусы анизотропии, выходящие из центров тетраэдрических пустот, проходят через центры протонов той же или смежной по вертикали ячейки. При этом тангенсы углов конусов анизотропии получаются теми же, что и для кубической симметрии.

Наклонные тройные оси симметрии ближнего порядка проходят через центры тетраэдрических и октаэдрических пустот. Проведенное исследование

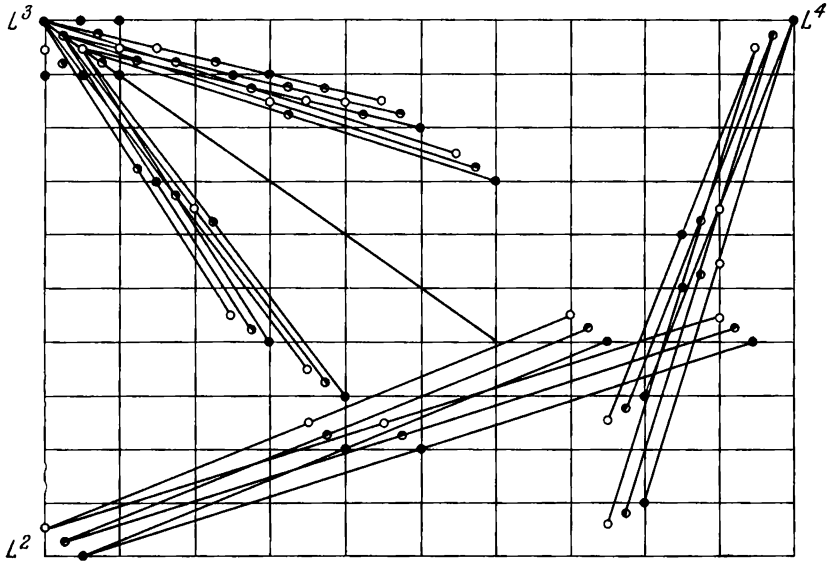


Рис. 4. Конусы анизотропии при кубической плотнейшей упаковке

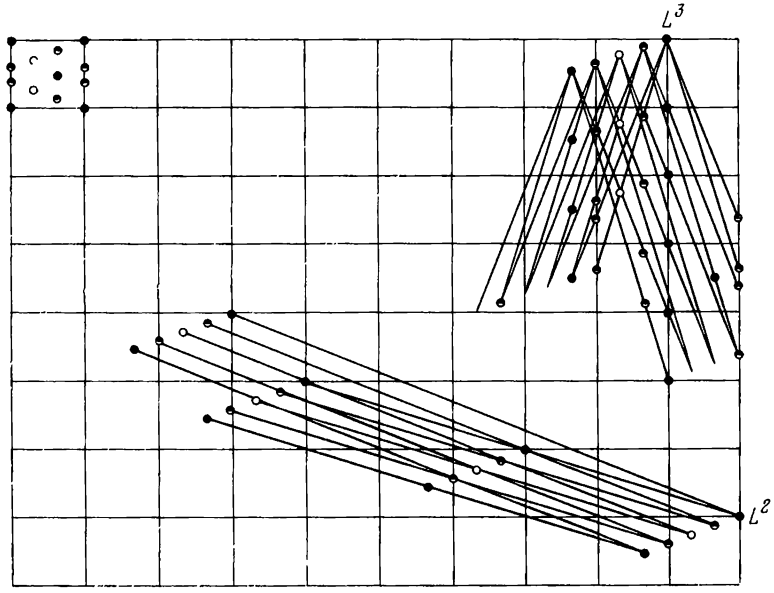


Рис. 5. Конусы анизотропии при гексагональной плотнейшей упаковке

показало, что протонные и электронные конусы анизотропии вокруг этих осей проходят через центры атомов или октаэдрических и тетраэдрических пустот, но не смежных, а более далеких — третьих и четвертых ячеек, что заметно ослабляет взаимодействие между частицами. То же относится и к горизонтальным или наклонным двойным осям симметрии ближнего порядка.

Вообще для плотнейших кубической и гексагональной упаковок тангенсы углов между осями симметрии и центрами атомов, тетраэдрических и

октаэдрических пустот могут быть описаны формулами вида $\operatorname{tg}\alpha = m\sqrt{2}/n$, где m и n — целые числа.

Из изложенного следует, что в двух наиболее распространенных плотнейших кубических и гексагональных ячейках центры атомов и центры октаэдрических и тетраэдрических пустот попадают на протонные или электронные конусы анизотропии, выходящие из аналогичных центров окружающих ячеек. Но так как каждая элементарная ячейка окружена многими соседними, то центры каждого атома и центры октаэдрических и тетраэдрических пустот являются точками пересечения многих протонных или электронных конусов анизотропии ядер и электронов оболочек атомов. Вероятно ожидать, что электроны проводимости будут попадать в центры октаэдрических и тетраэдрических пустот, где они будут играть как бы роль анионов.

Отсюда вытекает весьма важный вывод. Строение кристаллов теснейшим образом связано с конусами анизотропии элементарных частиц, входящих в состав ядер или электронных оболочек атомов. Этот вывод основан на анализе строения кубических и гексагональных кристаллов при плотнейшей упаковке. Весьма вероятно, что он имеет более общий характер, и потому такое же явление должно наблюдаться и для других кристаллических решеток, что подлежит дальнейшей проверке. На ряде примеров нами будет показано, что это действительно так.

Сам факт получения практически одинаковых тангенсов углов, выведенных, с одной стороны, теоретическим путем на основе ТФП для элементарных частиц, а с другой — из геометрии симметричных кристаллических решеток, заслуживает самого пристального внимания.

Электронные оболочки в кристаллах элементов

Поскольку элементы первого периода, т. е. водород и гелий, при комнатной температуре являются газами, мы их кристаллы, образующиеся при очень низких температурах, рассматривать не будем, а начнем с разбора кристаллов элемента второго периода таблицы Менделеева — с лития.

Было найдено, что ядро атома лития состоит из семи ядерных протонов и четырех метонов. Наиболее симметричное их взаимное расположение получается в виде объемно-центрированного окраэдра. Оси конусов анизотропии при этом будут направлены по трем взаимно перпендикулярным четверным осям симметрии. При этом для шести внешних протонов их магнитные моменты взаимно уравновесятся. Только один центральный протон не будет иметь себе пары и потому создаст магнитный момент ядра. Наиболее вероятное направление оси соответствующего конуса анизотропии для него будет по одной из тройных осей симметрии ядра. Четыре метона, вероятнее всего, расположатся по углам тетраэдра. Оси анизотропии их конусов совпадают с тройными осями симметрии протонного октаэдра. Таким образом, ядро лития по распределению зарядов будет относиться к кубической сингонии, но один из моментов его не будет скомпенсирован и окажется направленным по тройной оси симметрии. Поэтому мы вправе ожидать, что это направление выделится и в кристаллической решетке данного элемента.

Электронная оболочка лития, как известно, состоит из трех электронов $1s^2 2s^1$. Внутренняя $1s^2$-оболочка будет статистически сферически-симметричной, а внешний электрон, наиболее вероятно, будет захвачен неспаренным конусом анизотропии ядра. При соединении атомов лития их неспаренные

конусы анизотропии ядер будут стремиться расположиться соосно. Тогда неспаренные $2s^1$-электроны, вероятнее всего, попадут на пересечения конусов анизотропии двух смежных атомов. В результате образуется цепочка из ядер лития, связанных между собой такими одноэлектронными тороидами. Возле каждого атома лития образуется двухэлектронная внешняя $2s^2$-оболочка, состоящая из двух одноэлектронных тороидов.

Одна из возможных кристаллических решеток лития будет состоять из четырех групп таких цепочек, каждая из которых будет идти по непересекающимся тройным осям симметрии L^3. В этом случае возникнет кубическая объемно-центрированная решетка α-лития. На каждую такую ячейку, как известно, приходится по два атома. Одни из них располагаются в углах ячеек, а другие — в их центрах. Так как во внешней электронной оболочке атома лития содержится один легко ионизируемый электрон, на одну элементарную ячейку придется только два электрона проводимости. В каждой такой ячейке центральный атом окружен восемью равноудаленными ближайшими соседями. Поэтому в ячейке имеется восемь мест посередине между центральным и угловыми атомами, куда могли бы попасть электроны проводимости. Два наличных электрона проводимости могут быть наиболее симметрично размещены в ячейке только по одной из четырех тройных осей симметрии. Это хорошо согласуется с упомянутой особенностью строения ядра лития. Но при этом ячейка потеряет свою кубическую симметрию.

Кубическая симметрия кристалла лития в целом может быть получена, только если в нем образуется сверхструктура, ячейка которой будет иметь удвоенный размер ребра и состоять из восьми элементарных объемно-центрированных ячеек.

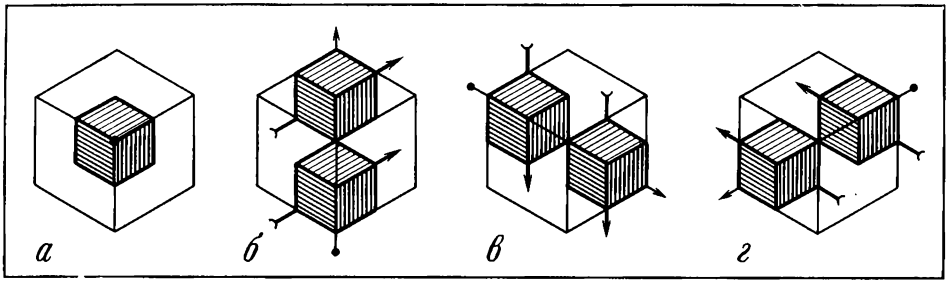


Рис. 1. Расположение тройных осей симметрии в кристалле лития

Всего в такой структуре будет 8·8 = 64 места, куда потенциально могут попадать электроны проводимости. Но на самом деле их только 8·2 = 16, или 25% от наличных мест. Столь малое заполнение межатомного пространства электронами и низкий их потенциал ионизации (6,39 *эв*) будут соответствовать довольно малому электрическому сопротивлению лития, т. е. его металлическим свойствам (8,6—9,4 *ом/м*).

Для сохранения кубической симметрии такой сверхструктуры необходимо предположить, что электроны проводимости расположатся на тройных осях симметрии, не пересекающихся между собой. Так как элементарных ячеек — восемь, а тройных осей симметрии — только четыре, то в сверхструктуре для каждого из направлений тройных осей симметрии будет иметься по две элементарные ячейки. Одна пара таких ячеек расположится

друг над другом, и тройная ось симметрии пройдет перпендикулярно к плоскости чертежа (рис. 1, *а*). Тройные оси симметрии трех других пар ячеек будут проходить наклонно к плоскости чертежа, так как это показано на рис. 1, *б*, *в*, *г*.

В этом случае параллельно каждой из тройных осей симметрии в кристалле вытянется цепочка связанных между собой атомов лития. В таком же направлении вытянутся и оси конусов анизотропии всех атомов лития, входящих в данную цепочку. Тогда между каждой парой смежных атомов будет существовать кольцо пересечения протонных конусов анизотропии. По кольцу на среднем расстоянии от ближайших атомов около 1,6 Å будет двигаться электрон проводимости, образуя одноэлектронный тороид, связывающий смежные атомы. За каждый оборот при прецессии элементарной частицы напряженность поля будет меняться на несколько порядков, и поэтому электрон будет сильно отклоняться от средней своей траектории, образуя за много оборотов тороидальное электронное облако.

Кристалл лития будет представлять собой четыре системы таких цепочек, направленных параллельно четырем тройным осям симметрии. Связи между цепочками различных направлений будут существенно более слабыми, чем связи внутри цепочек. Поэтому литий должен быть мягким, пластичным и легкоплавким металлом, что и наблюдается в действительности.

Вторая полиморфная модификация β-лития характерна гексагональной плотнейшей упаковкой, в которой на каждый атом приходится по две тетраэдрических и одна октаэдрическая пустота. Электроны проводимости при такой упаковке занимают 50% тетраэдрических пустот. Каждый атом будет окружен четырьмя электронами проводимости, расположенными по тетраэдру, а каждый электрон проводимости — четырьмя остовами атомов лития, также расположенными по тетраэдру.

В такой решетке естественно ожидать, что все оси конусов анизотропии будут повернуты параллельно одна другой и общей тройной оси симметрии ячейки. Проведя протонные конусы анизотропии с углом, для которого $\operatorname{tg}\gamma = \frac{2\sqrt{2}}{9}$, заметим, что каждые три таких конуса анизотропии пересекаются в центре тетраэдрической пустоты соседней с ней по вертикали ячейке. Поэтому электроны проводимости будут стремиться разместиться в центрах тетраэдрических пустот. При этом строя их конусы анизотропии с углом раствора, для которого $\operatorname{tg}\gamma = \frac{2\sqrt{2}}{7}$, обнаружим, что на пересечении каждых трех конусов анизотропии электронов одного слоя попадают ядра лития той же ячейки.

Таким образом, для подобной упаковки электроны будут расположены на пересечениях конусов анизотропии ядер, а ядра — на пересечении конусов анизотропии электронов. Наивероятнейшее среднее расстояние от ядер лития до электронов проводимости составит около 1,9 Å, или на 20% больше по сравнению с объемно-центрированной кубической ячейкой, как за счет того, что число электронов в оболочке атома увеличится с 2 до 4, так и вследствие того, что каждый из электронов проводимости будет находиться не между двух, а между четырех остовов лития. Надо полагать, что такая оболочка, куда входит один собственный и три соседних электрона может быть описана при помощи sp^3-гибридизированной волновой функции.

Особенностью данной кристаллической решетки является то, что каждый электрон проводимости связан с ближайшими к нему остовами атомов сла-

бее, чем с более далекими, но находящимися на пересечении конусов анизотропии.

Третья полиморфная модификация γ-лития является плотнейшей кубической, с ребром ячейки 4,36—4,33 Å. Число атомов, приходящихся на одну такую ячейку, равно 4.

Как было показано, для такой ячейки конусы анизотропии ядер будут направлены по ее тройным осям симметрии и пересекутся в центрах тетраэдрических пустот соседних ячеек. Поэтому электроны проводимости будут занимать 50% тетраэдрических пустот. Их конусы анизотропии будут также направлены по тройным осям симметрии кристалла и пройдут через центры остовов атомов лития той же или смежных ячеек. Наивероятнейшее расстояние между остовом и ближайшими к нему электронами 1,9 Å.

Надо полагать, что если все атомы будут иметь только правое или только левое вращение электронов, то каждый сорт атомов будет образовывать кристаллы кубической сингонии, имеющие двойники. Если же в кристалле одновременно и в равном количестве присутствуют правые и левые атомы, то образуется гексагональный кристалл, у которого произойдет чередование слоев, перпендикулярных тройной оси симметрии из правых и левых атомов. Такой кристалл не должен иметь двойников.

Таким образом, существует три полиморфные модификации лития, наиболее устойчивой из которых является α-модификация. Она образована из цепочек атомов, идущих по непересекающимся тройным осям симметрии ячеек. Цепочки прочны, но между собой связаны слабо.

В качестве следующего примера строения кристаллов элементов второго периода возьмем углерод.

Ядро наиболее распространенного изотопа углерода C^{12} состоит из 12 ядерных протонов и 6 метонов. Для его кубической модификации характерно расположение всех протонов по углам кубооктаэдра. Оси конусов анизотропии расположатся четырьмя группами параллельно четырем тройным осям симметрии ядра под тетраэдрическими углами одна к другой. Шесть метонов образуют правильный октаэдр, и их оси конусов анизотропии будут направлены по четверным взаимно перпендикулярным осям симметрии ядра.

Во внешней электронной оболочке нейтрального атома углерода содержится четыре электрона. Для ее завершения требуется еще четыре электрона. Алмаз представляет собой ковалентный кристалл, но его образование легче понять, если исходить из представлений об ионах. Пусть половина всех атомов углерода достроит свои оболочки до замкнутых восьмиэлектронных торотетраэдрических, превратившись в неонообразные ионы C^{4-} увеличенного размера. Тогда вторая половина атомов потеряет все свои внешние электроны и останется в виде мелких сферических гелийобразных ионов C^{4+}. Каждый торотетраэдрический неонообразный анион окружит себя четырьмя сферическими катионами, которые расположатся против центров его тороидов, т. е. по углам тетраэдра. В свою очередь, каждый катион окажется окруженным четырьмя анионами, также расположенными по тетраэдру. При этом четыре тороида от четырех соседних анионов образуют вокруг катиона замкнутую торотетраэдрическую неонообразную восьмиэлектронную оболочку, полностью аналогичную оболочке аниона. Каждый тороид окажется точно посередине между двумя атомами углерода, т. е. кристалл действительно получится ковалентным. Разница между катионами и анионами исчезнет, и все атомы углерода электрически будут эквивалентными.

Однако относительно бывших анионов электроны будут иметь одно направление вращения, а относительно бывших катионов — прямо противоположное.

Торотетраэдрическая симметрия каждого из атомов углерода в кристалле алмаза будет полностью соответствовать симметрии описанного ядра атома углерода. Тройные оси симметрии атомов будут совпадать как с осями вращения электронов в тороидах, так и с осями симметрии протонных конусов анизотропии ядра. Электронные оболочки при этом будут соответствовать sp^3-гибридизации.

Для каждого из атомов углерода координационное число будет равно четырем. Так, на рис. 2, *а* показаны четыре торотетраэдра, окружающих один центральный атом. Продолжая взаимную упаковку атомов, получим так называемую кубическую алмазную решетку, в которой одна половина атомов расположится в узлах одной гранецентрированной решетки, а другая — в промежутках между ними, заполнив при этом 50% тетраэдрических пустот. Таким образом, алмазную решетку можно представить как две плотнейшие взаимосвязанные кубические решетки, проникающие одна сквозь другую.

Обычно алмазную решетку изображают состоящей из шаров ковалентного радиуса, равного половине кратчайшего расстояния между атомами. Но тогда получается далеко не плотная упаковка. Если произвести плотнейшую упаковку только для половины всех атомов, но из шаров в $2\sqrt{2}/3 = 1{,}63$ раза большего размера, то получится кубическая упаковка с координационным числом не 4, а 12. Такая же плотнейшая упаковка может быть построена и для второй половины атомов. Тогда каждый шар одной упаковки пересечется с четырьмя шарами другой упаковки. Область пересечения шаров (перекрытия оболочек) будет в равной степени принадлежать обоим атомам. Именно в этой области расположатся электронные тороиды. Там же будет находиться и кольцевая линия пересечения ядерных конусов анизотропии смежных атомов. Электроны в среднем будут двигаться по окружностям несколько большего диаметра так, чтобы их конусы анизотропии проходили через ядра смежных атомов.

Каждый из двухэлектронных тороидов, притягивая два ближайших к нему ядра углерода и отталкиваясь от соседних электронных тороидов, образует звено прочного пространственного каркаса кристалла алмаза.

Четыре октаэдрические грани кристалла алмаза будут иметь одну конфигурацию поверхности — тороидами наружу (рис. 2, *б*), а четыре другие — иную, стыками трех тороидов наружу (рис. 2, *в*). Поэтому физические свойства этих граней будут несколько различаться. Грани куба (рис. 2, *г*) упакованы торотетраэдрами так, что между ними возникнут диагональные канавки, куда, вероятнее всего, смогут упаковаться при кристаллизации атомы углерода. Для этого им достаточно только несколько развернуть два тороида sp-гибридизации в стороны, причем вместе с уже имеющимися двумя тороидами на грани кристалла они образуют торотетраэдрическую оболочку вокруг этого атома, соответствующую sp^3-гибридизации.

Если бы новые атомы оседали на октаэдрических гранях кристалла алмаза, то у них получалась бы либо нехватка одного тороида, либо один тороид оказывался лишним. Поэтому скорость роста кристалла перпендикулярно к граням куба будет максимальной, что и приведет к образованию у кристалла шести вершин против центров шести граней куба, т. е. кристалл примет форму октаэдра.

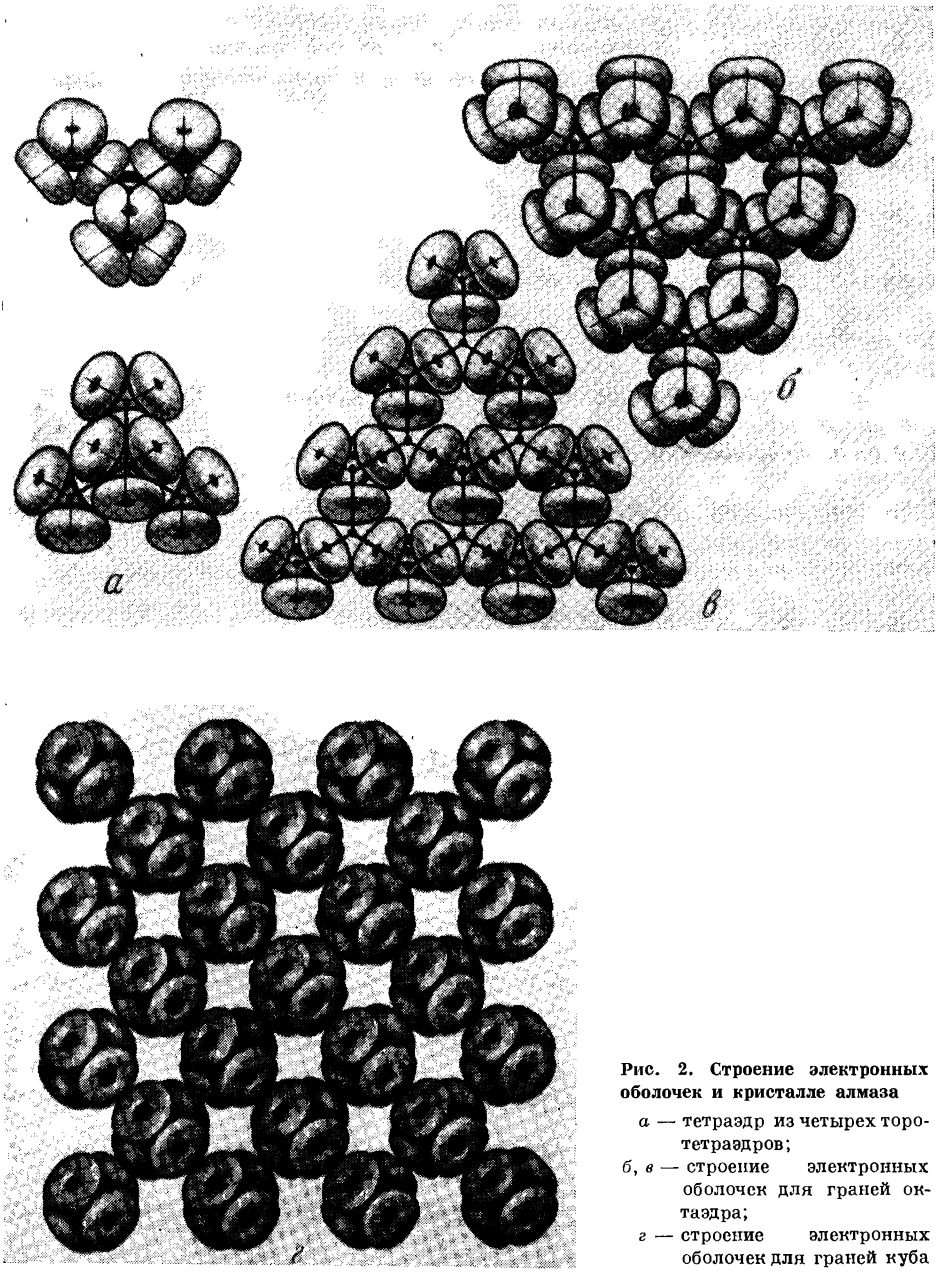


Рис. 2. Строение электронных оболочек и кристалле алмаза

а — тетраэдр из четырех торотетраэдров;
б, *в* — строение электронных оболочек для граней октаэдра;
г — строение электронных оболочек для граней куба

Грани октаэдра окажутся наиболее плотно «заселенными» атомами, а все расположенные на них тороиды (см. рис. 2,-*б*) — параллельными один другому и всей грани (а не под разными углами, как на грани куба). Поэтому наиболее вероятно, что спайность алмаза должна проходить параллельно граням октаэдра, а не куба.

Неспаренные электроны в кристалле алмаза отсутствуют, что должно придавать ему диэлектрические свойства и не приводить к поглощению лучей света, т. е. эти кристаллы должны быть прозрачными.

Как уже указывалось, у половины атомов электроны в тороидах будут вращаться по часовой стрелке, а у второй половины — против нее. Орбитальные моменты электронов в тороидах равны по величине и направлены под тетраэдрическими углами один к другому. Поэтому их геометрическая сумма для каждого из атомов окажется равной нулю. Спины четырех электронов получатся направленными к центру атома, а спины других четырех — от центра, так что геометрическая сумма снова будет равной нулю.

Силы электростатического отталкивания смежных тороидов будут стремиться развернуть электронные оболочки каждых двух смежных атомов в положение, симметричное относительно центров инверсии, расположенных посередине между ними, соответственно кубической симметрии. Магнитные силовые линии, стремясь укоротиться, наоборот, будут стремиться повернуть тороиды в зеркально-симметричное положение, соответствующее гексагональной симметрии.

Обычно электрические силы, ориентирующие тороиды, преобладают над магнитными, в результате чего возникает кубическая алмазная решетка. Если же по условиям кристаллизации местные магнитные взаимодействия где-либо возобладают, то торотетраэдры повернутся вокруг своих тройных осей симметрии на 60°. Эти оси будут перпендикулярны к плоскости одной из граней октаэдра. Вследствие параллельного расположения тороидов в этой плоскости не окажется препятствий для роста остальной части кристалла в повернутом положении. В результате возникнет двойник алмаза с плоскостями срастания в форме правильного шестиугольника. При наиболее частой, октаэдрической форме кристаллов алмаза двойникование произойдет по «шпинелевому» закону. Если же кристаллы получатся кубическими, то возникнет двойник прорастания, в котором два куба будут иметь общую тройную ось симметрии и окажутся повернутыми относительно нее на угол 60°.

Из-за наличия на гранях куба диагональных канавок между тороидами каждый новый атом углерода может быть упакован на такую грань только в одном единственном положении, поэтому двойникование по граням куба возникать не должно.

До последнего времени были известны только кубические кристаллы алмаза. Однако в принципе торотетраэдры могут расположиться в пространстве таким образом, что при сохранении тетраэдрических углов каждый последующий гексагональный слой атомов, перпендикулярный к одной из тройных осей симметрии кристалла, будет повернут относительно смежных слоев на 60 или 180°. При этом может возникнуть гексагональная модификация алмаза.

Если во всех слоях атомы углерода ориентированы одинаково (рис. 3, *а*), то получится трехслойная кубическая алмазная упаковка А — 4. Если же каждый последующий гексагональный слой будет повернут относительно предыдущего на 180° (рис. 3, *б*), то возникнет двухслойная гексагональная упаковка алмаза. Разрез кристалла алмаза, перпендикулярный к таким гексагональным слоям, показан на рис. 3, *в* для трехслойной кубической упаковки, а на рис. 3, *г* — для двухслойной гексагональной. В первом случае зигзагообразные цепочки атомов идут по диагонали чертежа (вдоль диагонали куба), а во втором — вертикально (параллельно тройной оси симметрии гексагонального кристалла).

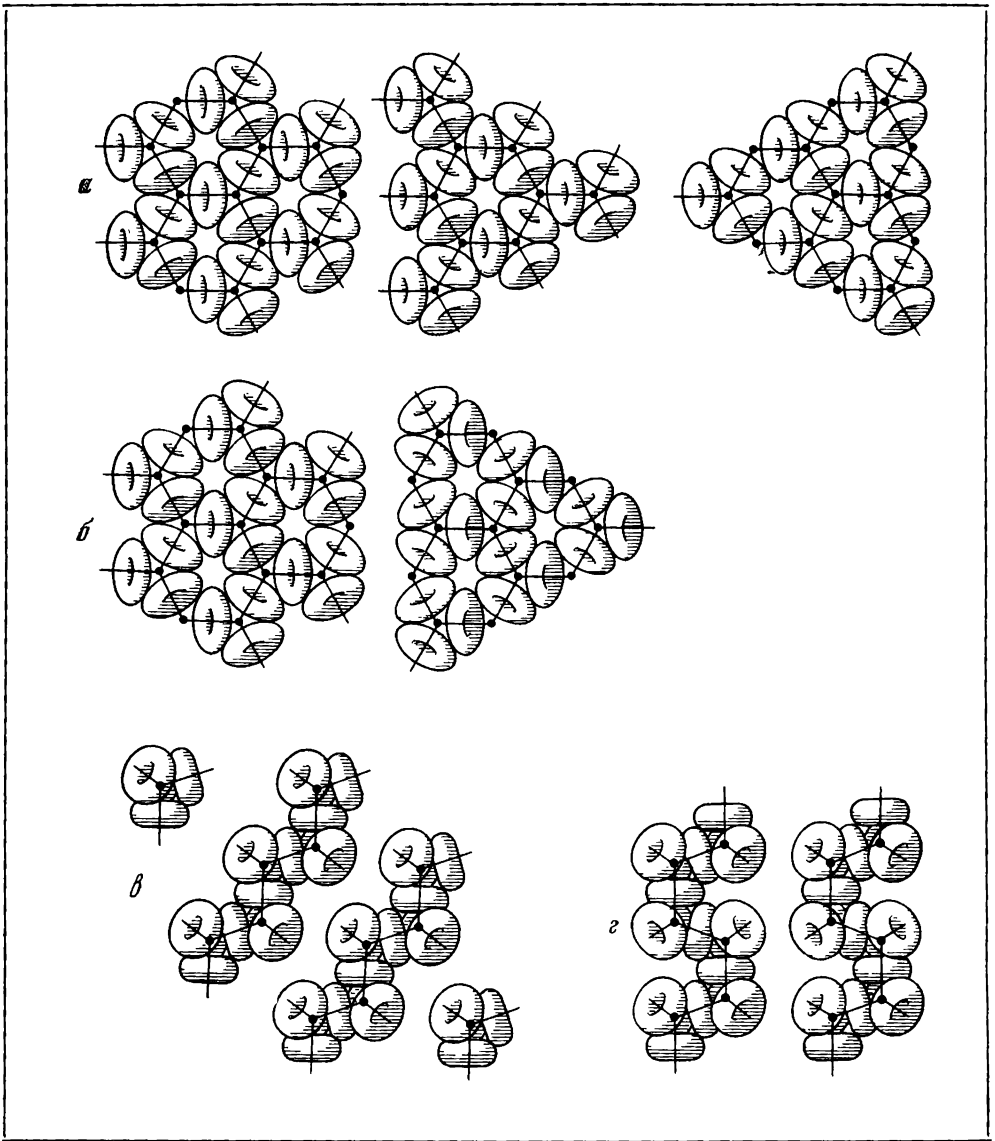


Рис. 3. Строение электронных оболочек алмаза в гексагональных слоях из торотетраэдров

Сопоставляя изложенные суждения о свойствах алмаза, вытекающие из особенностей строения его электронных оболочек, с опытом, заметим, что действительно алмаз кристаллизуется в кубической решетке алмазного типа, с расположением атомов в виде объемно-центрированных тетраэдров с ковалентными связями между ними. Алмаз чаще всего кристаллизуется в виде октаэдров, имеет совершенную спайность по граням октаэдра (111), образует двойники двух типов по этой грани, отличается исключительной

твердостью, не проводит электрического тока, прозрачен и не имеет собственного магнитного момента. В последние годы гексагональные алмазы были получены экспериментальным путем при сильном прессовании монокристаллов графита вдоль тройной оси симметрии в условиях высокой температуры.

Довольно подробное описание свойств алмаза имеется в книге И. И. Шафрановского [1], а также в работе Г. О. Гомона [2]. Библиографический указатель по синтезу и физическим свойствам алмазов составлен К. В. Флинтом и Н. В. Слесаревой [3].

Рассмотрим теперь графитовую полиморфную модификацию углерода. Помимо кубического ядра углерода C^{12} может существовать еще и ядро в виде тригональной усеченной дипирамиды, в котором протоны располагаются в три слоя $(3 + 6 + 3)$. Между ними размещаются шесть метонов по углам треугольной призмы. Ядро имеет одну вертикальную тройную ось симметрии и три перпендикулярные к ней двойные, составляющие одна с другой углы 120°. Оси конусов анизотропии протонов и метонов идут параллельно осям симметрии ядра.

При сближении атомов углерода образуются плоские гексагональные сетки, из которых при наложении их одну на другую образуется кристалл графита. На рис. 4, *а* показана такая сетка в плане. Пересечение конусов анизотропии вокруг двойных осей симметрии образует между каждой парой смежных атомов кольцо, по которому в среднем будут двигаться два электрона, связывая смежные ядра между собой. Кроме того, от каждого ядра будет идти группа конусов анизотропии с осью, перпендикулярной к плоскости чертежа. На некоторой высоте каждые шесть таких групп будут пересекаться в одной и той же точке над и под центром шестиугольного кольца. Эти точки хорошо видны на вертикальной проекции графита (рис. 4, *б*). Именно в них будут стремиться попасть неспаренные электроны проводимости. Интересно отметить, что точки пересечения конусов анизотропии попадают не на ближайшие к ядрам электроны, а на более далекие, связывая их между собой. На рис. 4, *г* и *в* показано строение электронных оболочек графита в плане и на вертикальном разрезе. Как видим, каждый атом окружен тремя тороидами, оси которых располагаются в одной плоскости чертежа под углами 120° одна к другой. Кроме того, 50% атомов имеют еще неспаренные электроны проводимости, расположенные над и под ними. Тороидальные электронные оболочки соответствуют sp^2-гибридизации и σ-связям. Неспаренные электроны проводимости можно рассматривать как негибридизированные π-электроны.

Гексагональные слои атомов накладываются один на другой таким образом, что выступающие наружу неспаренные электроны располагаются против центров гексагональных колец смежного слоя атомов. Для 50% атомов координационное число равно $3 + 2 = 5$, а для остальных 50% — только 3. Такая решетка соответствует дитригонально-дипирамидальному виду симметрии.

Как показывает геометрическое построение, расстояние между гексагональными сетками получается существенно больше, чем расстояния между атомами углерода в пределах одной сетки. Кажда сетка будет весьма прочной, а связь между ними, наоборот, слабой. Поэтому одна сетка может быть легко сдвинута вдоль другой. Поскольку электроны проводимости находятся далеко от атомов, на конусах анизотропии которых они лежат, связь между ними слаба и поэтому они относительно легко могут переходить

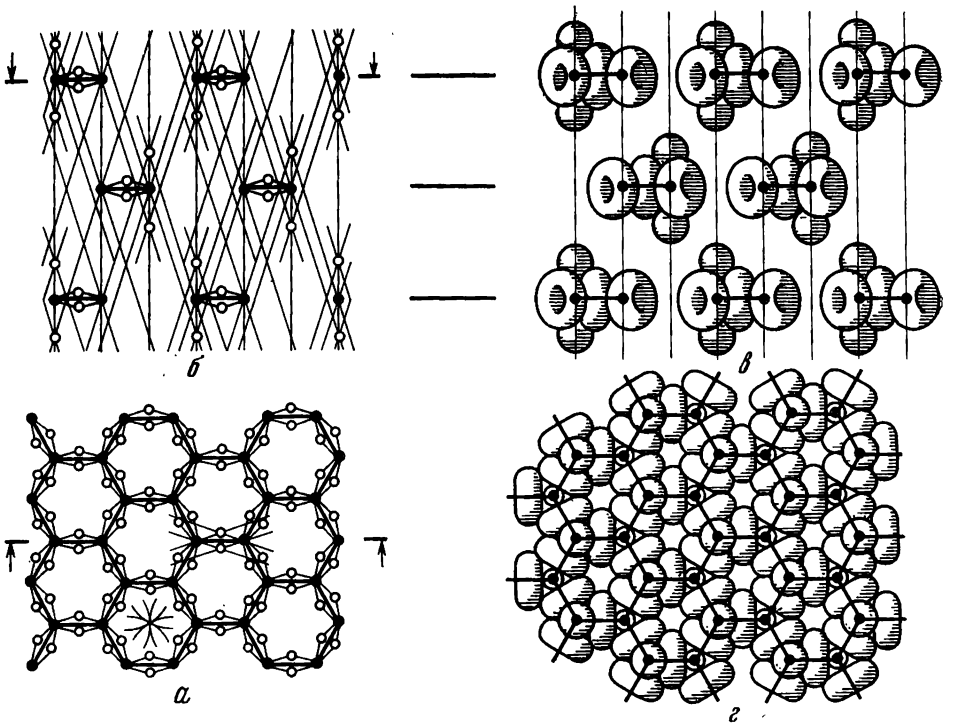


Рис. 4. Строение электронных оболочек α-графита

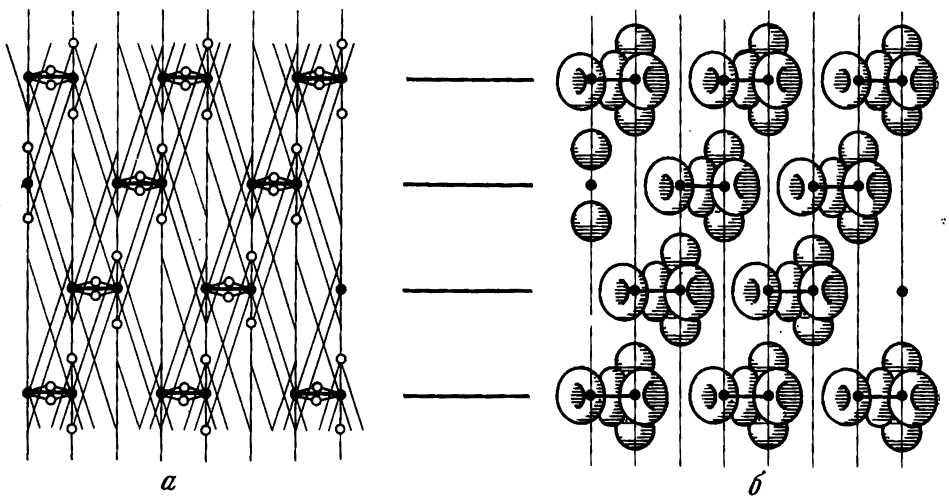


Рис. 5. Строение электронных оболочек β-графита

а — вертикальные конусы анизотропии; *б* — вертикальный разрез электронных оболочек

от одной точки пересечения конусов к другой под влиянием внешнего электрического поля. Поэтому кристаллы графита должны иметь высокую электропроводность вдоль слоев и очень низкую — в перпендикулярном направлении.

Помимо описанного двухслойного варианта α-графита возможен еще и трехслойный β-вариант упаковки гексагональных слоев (рис. 5). Для него характерно чередование по вертикали заполненной оболочки с незаполненной и с пустым центром шестиугольного кольца. Каждый следующий гексагональный слой будет сдвинут относительно предыдущего на одно межатомное расстояние, причем сдвиг происходит по направлению сторон правильного треугольника. Центры шестичленных колец расположатся по углам ромбоэдра, и вся решетка получится ромбоэдрической. Координационные числа для всех атомов равны $3 + 1 = 4$, причем межслоевые связи направлены в одну и ту же сторону. По сторению электронных оболочек атомы неодинаковые. Половина из них имеет завершенную восьмиэлектронную оболочку, а половина — только шестиэлектронную. Кроме того, одна половина электронов проводимости находится на пересечении шести конусов анизотропии, а другая — на пересечении только трех конусов. Поэтому данная полиморфная модификация графита должна быть менее устойчивой, чем описанная ранее. Поскольку симметрия и строение плоских гексагональных решеток во всех случаях упаковок сохраняются, возможны и более сложные упаковки, в которых будет происходить чередование рассмотренных вариантов.

Сопоставляя суждения о свойствах графита, вытекающие из анализа возможных конфигураций его электронных оболочек, заметим, что действительно графит обычно кристаллизуется в виде слоистых кристаллов дигексагонально-дипирамидального вида симметрии, состоящих из шестиугольных плоских сеток. Межатомные расстояния в пределах сетки равны 1,42 Å, что меньше 1,54 Å, характерных для алмазной модификации углерода. Расстояние между соседними слоями сеток получается равным 3,39 Å, т. е. много больше, чем межатомные расстояния в плане. Координационные числа действительно для одной половины атомов равны 5, а для другой — 3. Вследствие весьма совершенной спайности по плоскостям, параллельным плоским сеткам, графит служит хорошим смазочным материалом. По электро- и теплопроводности вдоль слоев графит сравним с металлами, а в поперечном направлении эти характеристики на четыре порядка меньше, чем у металлов. Графит действительно диамагнитен и непрозрачен. Ромбоэдрическая трехслойная упаковка для графита встречается редко.

Таким образом, все суждения, сделанные о свойствах графита на основе анализа его электронного строения, оправдываются на опыте. Важно также то, что описанное строение электронных оболочек графита самосогласуется со схемой пересечения конусов анизотропии для ядер углерода и с формой sp^2-гибридизированных оболочек.

Из элементов третьего периода таблицы Менделеева для примера рассмотрим строение кристаллов одной из модификаций серы.

Ядро атома серы состоит из 32 ядерных протонов и 16 метонов. Наиболее плотно протоны упакованы в виде куба с четырьмя срезанными по тетраэдру углами, а метоны — по усеченному тетраэдру (лавесовскому полиэдру). Все оси конусов анизотропии как протонов, так и метонов располагаются четырьмя группами, каждая из которых параллельна одной из тройных осей симметрии ядра. Таким образом, симметрия ядра является тетраэдрической.

В каждом отдельном атоме серы имеется по 6 внешних электронов, четыре из которых располагаются по тетраэдру (кремнийобразная оболочка), а два других — против центров двух граней этого тетраэдра. Таким образом, симметрии электронной оболочки атома серы и ядра самосогласованы. В каждой внешней оболочке атома серы не хватает двух электронов для того, чтобы она превратилась в замкнутую восьмиэлектронную аргонообразную оболочку в виде двух взаимно проникающих тетраэдров. Такое замыкание оболочек получается при объединении восьми (или шести) атомов серы в гофрированные кольца. Всего в восьмичленном кольце будет находиться $8 \cdot 4 = 32$ электрона в кремнийобразных тетраэдрических оболочках, которые не обобществляются, и еще $8 \cdot 2 = 16$ самых внешних электронов, часть которых поступает в общее пользование атомов кольца.

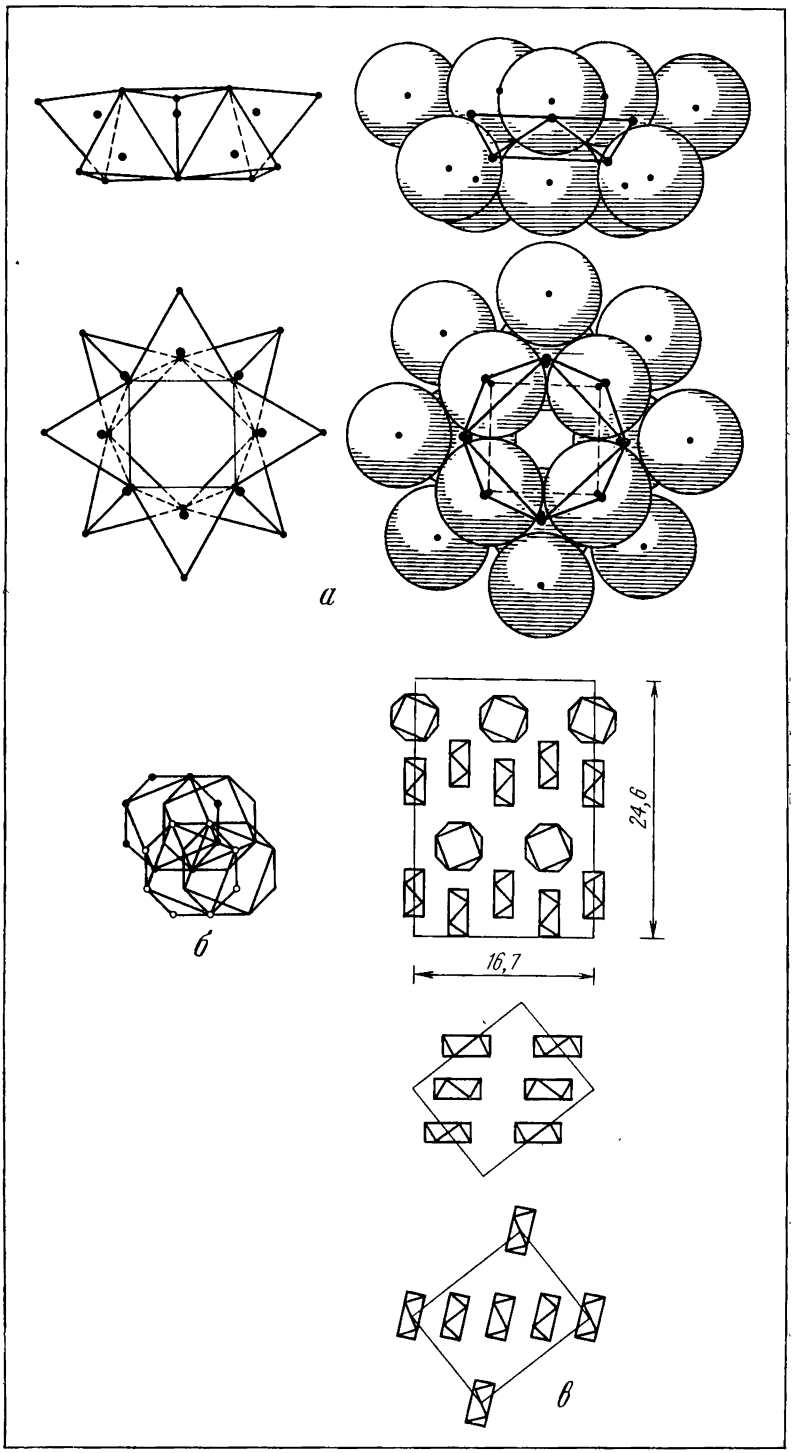
Чтобы 16 электронов оказалось достаточно для образования 8 тетраэдров (по числу атомов серы), последние должны иметь общие ребра и вершины. Единственная возможная конфигурация молеуклы S_8 при этом будет следующей (рис. 6, *а*). Четыре тетраэдра, связанные через вершины, образуют одно квадратное кольцо, а четыре остальных — другое кольцо. Одно расположится выше средней плоскости молекулы, а другое — ниже нее и окажется повернутым в плане относительно верхнего кольца на 45°. Соединив оба кольца, получим, что каждый тетраэдр верхнего кольца будет иметь по два общих ребра с двумя тетраэдрами нижнего кольца, и наоборот. В каждой обобществленной вершине при этом сойдутся один верхний тетраэдр и два нижних или наоборот. Четыре верхних тетраэдра будут наклонены вершинами кверху, а четыре нижних — книзу.

В центре каждого из этих тетраэдров разместится остов атома серы вместе с кремнийобразной электронной оболочкой. Четыре электрона оболочки будут направлены из центра тетраэдра к центрам четырех его граней. В результате возникнет гофрированное восьмиатомное кольцо молекулы серы. Расчет валентных углов для такой конфигурации дает углы 105°, соответствующие установленным опытным путем. Проведя из полученных шестнадцати точек шестнадцать касающихся сфер, получим приближенную форму граничной поверхности электронных облаков для молекулы S_8.

Такие кольца могут быть упакованы наиболее плотно рядом, либо соосно в одинаковом положении, либо с поворотом на 45° относительно четверной оси симметрии, проходящей через центр молекулы. В последнем случае против центров квадратных колец из электронов смежных молекул приходится один из угловых электронов второй молекулы. При этом (см. рис. 6, *б*) по вертикали молекулы располагаются то выше, то ниже, а по горизонтали — смещаются все время в одну сторону. Таким образом, возникает гофрированная скошенная цепочка из молекул S_8. Несколько таких цепочек, расположенных параллельно одна другой, образуют слой из колец S_8, на котором наблюдаются выступы, идущие под некоторым углом к направлению цепочек. При упаковке подобных слоев друг на друге цепочки разных слоев пойдут под углом, несколько меньшим 90°. Через четыре слоя наступает полное повторение упаковки. Выделив ячейку минимального объема, получим, что она должна быть ромбической и содержать 16 молекул S_8, упакованных

Рис. 6. Строение электронных оболочек α-серы

а — строение электронных оболочек молекул S_8; *б* —схема взаимной ориентировки в гофрированной цепочке; *в* — блок-схема упаковки молекул S_8 в кристалле α-серы


а
б
24,6
16,7
в

по 4 штуки в четырех перекрещивающихся под углом слоях. Блок-схема такой упаковки на двух уровнях в плане и в одной из диагональных плоскостей приведена на рис. 6, *в*.

Поскольку кристалл серы получается молекулярным, он должен быть легкоплавким (слабая связь между молекулами) и не проводить электрического тока.

Сопоставив с экспериментом, получим, что действительно одна из полиморфных модификаций α-серы является ромбической. Кристалл этот молекулярный и состоит из упакованных на ребро гофрированных кольцевых молекул S_8, которые образуют горизонтальные цепочки, гофрированные по вертикали и скошенные по горизонтали. Эти цепочки действительно располагаются по диагоналям основания ромбической ячейки в 4 слоя по 4 молекулы в каждом. Температура плавления серы составляет всего 112,8° С, и сера является электрическим изолятором.

В качестве первого примера элемента четвертого периода рассмотрим железо.

Ядро основного изотопа железа состоит из 56 ядерных протонов и 30 метонов. Наиболее симметричная упаковка для 56 протонов будут иметь вид тетраэдра с ребром из шести протонов. Все они могут быть сгруппированы в четыре группы по 14 протонов, оси анизотропии которых направлены параллельно четырем тройным осям симметрии ядра. Для отыскания наиболее симметричной метонной фигуры возьмем тетраэдр с ребром из пяти метонов. Общее число метонов в нем будет 35. Удалив из него четыре метона с углов и один из центра, получим симметричную фигуру в виде усеченного тетраэдра (лавесовского полиэдра), состоящего из 35 — 5 = 30 метонов. Оси конусов анизотропии для шести метонов, находящихся на серединах ребер этого тетраэдра, направлены вдоль трех взаимно перпендикулярных двойных осей симметрии этой фигуры. Остальные 30 — 6 = = 24 метона образуют четыре группы по 6 метонов, оси конусов анизотропии которых направлены параллельно четырем тройным осям симметрии ядра под тетраэдрическими углами одна к другой. Таким образом, как протонная, так и метонная упаковки ядра будут обладать одной и той же группой симметрии кубической сингонии, обладающей четырьмя тройными и тремя двойными осями симметрии.

Внешняя электронная оболочка одиночного атома железа состоит из остова (рис. 7, *а*) в виде хромоподобной электронной фигуры из шести внешних $3d$-электронов, расположенных по углам октаэдра. Орбитальные и спиновые моменты электронов этого остова направлены параллельно трем взаимно перпендикулярным двойным осям симметрии этого октаэдра в прямо противоположных направлениях, и потому их геометрическая сумма равна нулю и остов атома диамагнитный. Упомянутые оси будут двойными, а не четверными из-за того, что внутренняя аргоноподобная электронная оболочка атома железа обладает тетраэдрической симметрией и поэтому восемь граней октаэдра будут не эквивалентными одна другой, а окажутся состоящими из двух четверок граней, несколько отличающихся по степени экранирования внутренними оболочками. Минимальной экранировка будет против центров четырех граней октаэдра остова, вдоль четырех тройных осей симметрии под тетраэдрическими углами одна к другой, т. е. будет полностью соответствовать направлениям конусов анизотропии ядра.

Два оставшихся внешних электрона проводимости атома железа вследствие экранирования будут связаны с ядром слабее, чем электроны остова

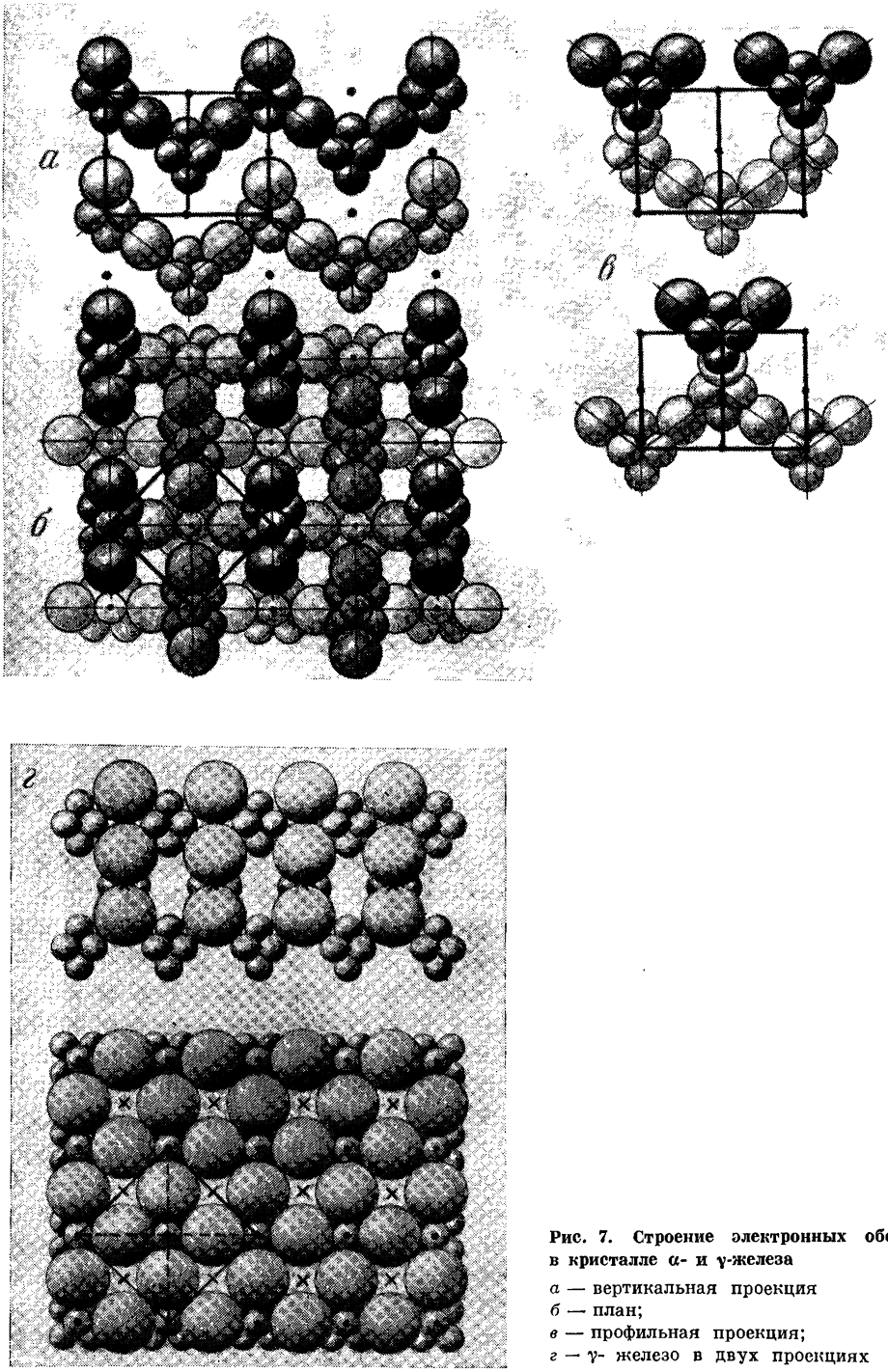


Рис. 7. Строение электронных оболочек в кристалле α- и γ-железа

а — вертикальная проекция
б — план;
в — профильная проекция;
г — γ- железо в двух проекциях

их потенциалы ионизации составляют всего 7,78 и 16,18 *эв*), и расположатся против двух из четырех граней октаэдрического остова, понизив симметрию одиночного атома железа (у него останутся только две плоскости симметрии и двойная ось симметрии на их пересечении). Орбитальные и спиновые моменты этих электронов будут направлены под тетраэдрическими углами один к другому в соответствии с осями симметрии остова атома. Геометрическая сумма моментов даст только одну слагающую вдоль одной (вертикальной) из осей L_4^2 октаэдрического остова, так как перпендикулярные к ней составляющие будут направлены в противоположные стороны и потому скомпенсируются.

Остальные два центра граней октаэдрического остова, расположенные в плоскости, перпендикулярной к предыдущей плоскости симметрии атома, должны быть заняты электронами проводимости соседних атомов. Каждый атом железа поддерживает своими выступающими электронами проводимости двух соседей сверху и в свою очередь будет поддерживаться электронами проводимости двух соседних атомов снизу. Каждый остов железа окажется в центре между четырьмя размещенными по тетраэдру внешними электронами, а каждый такой электрон — на тройной оси симметрии, проходящей через центры смежных атомов железа. В результате образуется пространственная кристаллическая подрешетка в виде объемно-центрированных тетраэдров, связанных своими углами (алмазоподобная типа А — 4). Однако упаковка атомов при этом получится настолько неплотной, что в пустых полостях первой пространственной подрешетки сможет разместиться вторая такая же пространственная подрешетка. Обе они будут проникать одна сквозь другую, как звенья цепи, но не в одном, а во всех трех взаимно перпендикулярных направлениях. На рис. 7 в трех проекциях показаны зигзагообразные перекрещивающиеся цепочки, из которых состоят обе подрешетки. Они отмечены на рисунке разной густотой тона.

Совокупность обеих подрешеток дает кубическую объемно-центрированную решетку. Ребра такого элементарного куба показаны на чертеже жирными линиями. На вертикальной и профильной проекции этот куб повернут к читателю своим ребром. В плане он виден повернутым на 45°. Если же смотреть на каждую подрешетку вдоль тройной оси симметрии, проходящей по пространственной диагонали куба, то решетка будет иметь вид гофрированных шестиугольных колец. При этом стыки колец разных слоев одной подрешетки будут находиться в центрах колец второй подрешетки, и наоборот.

В результате получится, что каждый октаэдрический остов атома железа обеих подрешеток будет окружен четырьмя электронами, расположенными против центров четырех из восьми граней, и каждый внешний электрон окажется между двумя смежными остовами, там где пересекаются два конуса анизотропии ядер смежных атомов, образуя между ними одноэлектронный тороид. Каждые четыре электрона, размещенных по тетраэдру, будут принадлежать одной из подрешеток. Их орбитальные моменты и спины расположатся под тетраэдрическими углами. Все четыре орбитальных момента будут направлены либо к центру, либо от центра атома и потому окажутся скомпенсированными. Но два спиновых момента направлены к центру и два — от центра каждого атома. В результате они дадут общую составляющую момента, направленную вдоль одной из двойных осей симметрии атома, т. е. параллельно одному из ребер кубической ячейки кристалла α-железа.

Вторая пронизывающая подрешетка устроена совершенно аналогично. Суммарный спиновый момент ее электронов проводимости будет направлен параллельно суммарному моменту первой подрешетки. Наличие этих моментов приведет к возникновению ферромагнетизма. Момент каждого из электронов проводимости может занимать одно из двух положений — от центрального атома к угловому или наоборот. Направление суммарного магнитного момента в кристалле зависит от того, сколько электронов дадут слагающую в одном и том же направлении. Воздействием достаточно сильного внешнего магнитного поля можно повернуть спиновые моменты внешних электронов таким образом, что их суммарный момент направится по любой из трех взаимно перпендикулярных четверных (точнее двойных) осей симметрии кубического объемно-центрированного кристалла. Таким образом, возникновение доменов или перемагничивание кристаллов α-железа связано не с поворотом целых атомов, а только с переориентировкой внешних электронов проводимости.

Сравнив гранецентрированную и объемно-центрированную кубические ячейки, нетрудно заметить совпадение у них ряда характерных точек. Так, атомы в углах ячейки расположены в них одинаково. В центре первой ячейки имеется октаэдрическая пустота, а в центре второй — атом. Центры тетраэдрических пустот первой ячейки совпадают с серединами расстояний между центральным и угловыми атомами второй ячейки. Поэтому конусы анизотропии ядер и электронов, проходящие через эти характерные точки в гранецентрированной ячейке, пройдут через соответствующие точки и объемно-центрированной ячейки. Следовательно, и для такой ячейки будет характерно попадание ядер атомов на электронные конусы анизотропии и электронов — на протонные конусы анизотропии в соседних ячейках.

При нагреве железа выше точки Кюри из-за сильных и беспорядочных тепловых колебаний остовов атомов первоначальная упорядоченная ориентация спинов внешних электронов изменится. Когда спиновые моменты будут направлены либо к каждому атому, либо от него, геометрическая сумма всех спиновых моментов станет равной нулю на каждом из таких атомов. Следовательно, кристалл железа, сохранив свою объемно-центрированную решетку и только слегка увеличив ее размеры за счет теплового расширения, потеряет ферромагнитные свойства и станет парамагнетиком (β-железо).

Вокруг каждого атома железа имеется на равных расстояниях от него восемь других ближайших атомов, но только с четырьмя атомами своей подрешетки он связан электронами проводимости. Четыре другие возможные положения для электронов между смежными атомами разных подрешеток вакантны. При воздействии внешнего электрического поля электроны проводимости смогут перемещаться, переходя из одного положения между атомами в соседнее вакантное место между атомами разных подрешеток. Но там экранировка каждого из атомов более сильная, и потому электрон проводимости перейдет на место электрона второй подрешетки, вынуждая его освободить место. Этот электрон, в свою очередь, вытеснит третий по ходу электрон и т. д. Такой процесс последовательного перехода электронов происходит не одновременно, а распространяется со скоростью света. Следовательно, железо должно проводить электрический ток. При перемещении электронов проводимости из одной потенциальной ямы в другую возникают колебания смежных с ними атомов, что приведет к нагреву кристалла железа. Электроны проводимости железа, слабее связанные с ядром, чем

электроны атомных остовов, будут легко поглощать кванты света различных частот. Поэтому кристалл железа должен быть непрозрачным.

В рассмотренных кристаллических решетках α- и β-железа их октаэдрические электронные остовы обращены один к другому своими гранями, между которыми и размещается внешний электрон. При дальнейшем нагревании расстояния между атомами еще несколько увеличатся и атомы смогут перегруппироваться так, что смежные остовы расположатся один к другому ребром. Тогда каждый остов будет иметь вокруг себя уже не 8, а 12 ближайших соседей по числу ребер у октаэдра (рис. 7), т. е. решетка превратится из двух проникающих одна сквозь другую подрешеток в единую кубическую плотнейшую (γ-железо). Каждый электрон проводимости при этом будет окружен четырьмя равноправными остовами атомов железа, расположенными по тетраэдру, а каждый остов — восемью электронами проводимости.

Каждый электрон проводимости находится в месте пересечения четырех конусов анизотропии от четырех смежных ядер атомов железа. При этом его собственный конус анизотропии, а следовательно, и спиновый момент могут быть направлены по любой из четырех равноправных тройных осей симметрии к любому из четырех остовов. Поэтому следует ожидать получения статистически равноправного расположения спиновых моментов электронов проводимости и отсутствия ферромагнетизма у γ-железа. Каждый остов атома железа будет обращен к электрону проводимости одной из граней октаэдра. Таким образом, внешний электрон проводимости окажется в центре кубооктаэдра из $4 \cdot 3 = 12$ электронов. Наличие большого числа конусов анизотропии этих электронов, окружающих электрон проводимости, должно затруднять его выход из потенциальной ямы в центре тетраэдрической пустоты. Кроме того, электроны проводимости занимают все тетраэдрические пустоты в кристаллической решетке, что затрудняет их перемещение. Поэтому следует ожидать повышения электрического сопротивления для γ-железа.

Сопоставляя изложенные следствия из анализа строения электронных оболочек кристаллов железа с опытными данными, заметим, что железо действительно кристаллизуется, образуя объемно-центрированную кубическую решетку (α-железо). Оно обладает ферромагнитными свойствами по одной из четверных осей симметрии куба, способно к перемагничиванию под действием внешнего магнитного поля на 180°, а также в двух взаимно перпендикулярных направлениях к этой оси. При нагревании до 770° С железо переходит в парамагнитное состояние, но сохраняет свою объемно-центрированную решетку (β-железо), а затем при температуре 1400° С образует кубическую гранецентрированную решетку (γ-железо). Межатомные расстояния в нем при этом возрастают незначительно —от 2,50 до 2,58 Å. Железо является электропроводным и непрозрачным.

Из числа элементов четвертого периода рассмотрим еще строение кристалла меди. Ядро наиболее устойчивого изотопа меди содержит 63 ядерных протона и 34 метона. Первые наиболее симметрично и плотно могут быть упакованы в виде куба, на каждой грани которого размещаются по диагональным направлениям 13 протонов. Их оси конусов анизотропии направлены по трем четверным осям симметрии через центры граней куба, по четырем тройным осям симметрии через углы куба под тетраэдрическими углами одна к другой и по шести двойным осям симметрии, идущим из центра ядра к серединам ребер куба под углами 60 и 90° между ними. Эта упаковка имеет один протон, находящийся в центре ядра, ось конуса анизотропии

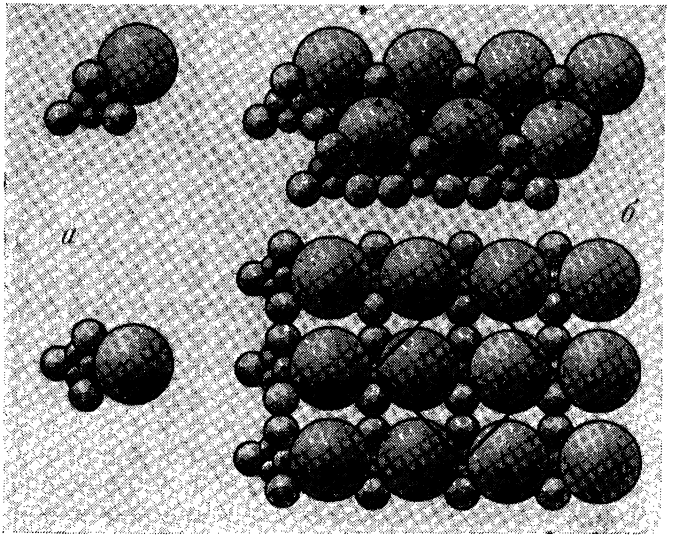


Рис. 8. Строение электронных оболочек кристалла меди
а — отдельный атом; *б* — кубическая гранецентрированная решетка в двух проекциях

которого может быть направлена по любой из упомянутых осей, но наиболее вероятно — по одной из тройных осей симметрии.

34 метона наиболее компактно могут быть упакованы в виде кубооктаэдра с четырьмя центрированными шестиугольными гранями из восьми наличных. Таким образом, симметрии протонной и метонной фигур не противоречат одна другой.

Форма внешней электронной оболочки одиночного атома меди представляет собой никельподобный тетраэдрический десятиэлектронный остов, в котором шесть электронов располагаются по углам октаэдра, а четыре остальных размещаются по местам минимальной экранировки против центров четырех из восьми его граней. Направления орбитальных и спиновых моментов этих электронов будут совпадать с направлениями четверных и тройных осей симметрии ядра и электронной оболочки. Геометрическая сумма моментов будет равна нулю, и поэтому остов атома будет диамагнитным.

Поверх никелеподобного остова атома против центра одной из его граней размещается неспаренный электрон проводимости, орбитальный и спиновый моменты которого направлены по одной из тройных осей симметрии остова атома. Потенциал ионизации для этого электрона равен 7,724 *эв*, в то время как для ионизации электронов остова потребуется не менее 20 *эв*. Благодаря внешнему электрону одиночный атом меди парамагнитен.

На тетраэдрическом остове атома меди можно наиболее устойчиво упаковать четыре электрона проводимости. Так как для одновалентной меди число остовов будет равно числу электронов, каждый электрон при этом должен быть окружен четырьмя остовами, расположенными по тетраэдру. Тогда образуется кубическая гранецентрированная (плотнейшая) упаковка (рис. 8). Одна из граней элементарной ячейки такой решетки отмечена на нижней проекции.

Решетка получается связанной неспаренными электронами, которые играют роль как бы анионов, находящихся в тетраэдрических пустотах между атомными остовами. Совместное притяжение к четырем окружающим электрон остовам приведет к увеличению его расстояния до ядер каждого из них по сранению с расстоянием в одиночном атоме. Под влиянием внешнего электрического поля эти электроны, сравнительно слабо связанные с тетраэдрическими остовами атомов, могут быть относительно легко смещены из центров тетраэдрических пустот. Смещение каждого из них вызовет смещение следующего соседа, к которому он приблизится и т. д. Это возмущение будет распространяться со скоростью света, хотя сами электроны могут двигаться с намного меньшей скоростью. Распространение смещений представляет собой ток проводимости, следовательно медь должна быть электропроводной.

При температурах, близких к абсолютному нулю, энергия, затрачиваемая электроном на раздвигание окружающих его остовов, будет равна энергии, которую они вернут ему, смыкаясь позади него. Поэтому электроны смогут двигаться по решетке практически без потерь. Но при более высоких температурах остовы атомов беспорядочно колеблются, что затрудняет свободное движение электронов вдоль проводника. Этим объясняется омическое сопротивление меди. С другой стороны, электрон, преодолевая искаженные тепловыми колебаниями каналы внутри решетки, вызовет усиление колебаний раздвигаемых остовов, что будет эквивалентным тепловому действию электрического тока. Наличие электронов проводимости приведет к поглощению света, и поэтому кристаллы меди должны быть непрозрачными.

В центре каждой тетраэдрической пустоты пересекаются конусы анизотропии протонов и метонов, оси которых направлены по тройным осям симметрии кристалла. Электрон проводимости может быть ориентирован по любой из четырех таких осей. В электрическом отношении все остовы атомов меди эквивалентны. Но в магнитном отношении между ними будет известная разница. Одна четверть всех остовов будет окружена электронами, моменты которых ориентированы под тетраэдрическими углами один к другому и пересекаются в центре одного из атомов. Остальные три четверти остовов окружены электронами, моменты которых также расположены под тетраэдрическими углами, но не пересекаются между собой. В обоих случаях суммарный момент электронов проводимости, окружающих каждый атом, равен нулю. Так как нет оснований для того, чтобы различные атомы меди в кристалле были бы в чем-то различны по свойствам, следует полагать, что электроны проводимости будут поочередно ориентироваться на каждый из окружающих атомов меди. Тогда все атомы окажутся статистически эквивалентны и в магнитном отношении. Кристаллы меди будут вести себя как диамагнетики.

Сопоставив описанные соображения, вытекающие из анализа электронного строения кристаллов меди, с опытом, заметим, что действительно медь кристаллизуется в кубической сингонии и дает плотнейшую гранецентрированную упаковку, хорошо проводит электрический ток, оказывает ему омическое сопротивление и нагревается при его прохождении, является непрозрачной и диамагнитной.

В качестве последнего примера рассмотрим элемент шестого периода таблицы Менделеева, для чего возьмем кристалл α-вольфрама.

Внешняя электронная оболочка атома вольфрама имеет шесть электронов, расположенных по углам октаэдра. Для них оси конусов анизотропии

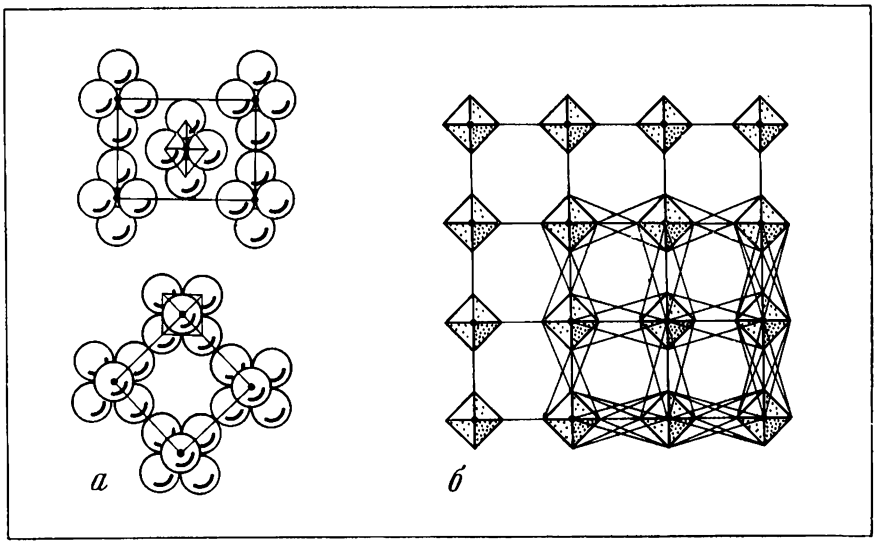


Рис. 9. Строение электронных оболочек в кристалле α-вольфрама
а — диагональный разрез и план; *б* — конусы анизотропии в плане

и моменты ориентированы по трем четверным осям симметрии октаэдра перпендикулярно одни к другим и в противоположных направлениях. Так же ориентированы и конусы анизотропии в ядре вольфрама. Кроме того, в ядре будут и конусы анизотропии, ориентированные по тройным осям симметрии атома.

Суммарный момент атома вольфрама будет равен нулю.

В первом приближении подобную оболочку можно представить состоящей из шести шарообразных электронных облаков, плотно упакованных по углам октаэдра.

При сближении атомов вольфрама наиболее устойчивая конфигурация получится, когда оси симметрии одного атома будут являться продолжением осей симметрии его соседей. Это условие будет удовлетворено при расположении атомов по углам кубической ячейки. Однако при этом в центре ячейки образуется большая пустота, в которой свободно разместится еще один атом. Таким образом, мы получили объемно-центрированную кубическую ячейку, которая и наблюдается в действительности для кристаллов α-вольфрама.

На рис. 9, *а* показано взаимное расположение атомов вольфрама в такой ячейке в диагональной плоскости, проходящей через два противоположных ребра куба, и в плане. Если соединить центры электронных облаков внешней оболочки каждого атома, то получим правильный октаэдр. На рис. 9, *б* показаны девять смежных элементарных ячеек кристалла вольфрама, повернутых на 45°. Для упрощения чертежа вокруг каждого из ядер вольфрама изображен упомянутый октаэдр.

Если принять радиус сферического электронного облака для одного электрона за единицу, то получим ребро электронного октаэдра равным 2, а ребро кубической ячейки равным $2 + 2\sqrt{2} = 4{,}82$. Если теперь провести

из каждого ядра и каждого электрона образующие конусов анизотропии под рассчитанными углами, попадающие в плоскость чертежа, то получим картину, изображенную на рис. 9, *б*.

В первом горизонтальном ряду нанесены только электронные октаэдры, во втором — электронные конусы анизотропии, в третьем — протонные, а в последнем, четвертом ряду изображены как электронные, так и протонные конусы анизотропии. Аналогичная картина показана и в вертикальных рядах слева направо.

Анализируя полученную картину, заметим, что пересечения протонных конусов анизотропии всех протонов четных атомов в ряду происходят почти точно (ошибка не более 1—2%) в центрах электронных облаков нечетных атомов, и наоборот. Возникающие при этом силы будут связывать атомы в цепочки вдоль ребер куба и прижимать электроны к остовам атомов. В то же время электронные конусы анизотропии для электронов, лежащих на оси цепочки, будут пересекаться практически в тех же местах, что и протонные, т. е. там, где размещаются центры электронных облаков смежных атомов, не лежащие на этой оси, а окружающие ее. Возникающие при этом силы будут отталкивающими. Электронные конусы анизотропии короче протонных и степень анизотропии для них выше, но зато на каждый электрон придется по несколько протонных конусов из ядра каждого атома. (В каждом ядре вольфрама содержится 184 протона и 110 метонов.) В результате силы притяжения и отталкивания окажутся равными. Подобная же картина получится и в других плоскостях граней куба.

Таким образом, все атомы вольфрама, находящиеся в углах элементарных ячеек, связаны между собой в прочный пространственный каркас. Он образует одну из подрешеток кристалла. Совершенно аналогичная вторая подрешетка образована из атомов вольфрама, расположенных в центрах элементарных ячеек. Эти подрешетки будут проникать одна сквозь другую как звенья цепи.

Подробный расчет показывает, что, кроме того, протонные конусы анизотропии одной из подрешеток, направленные по тройным осям симметрии, пройдут почти точно через центры электронных облаков ближайших атомов второй подрешетки, связывая обе подрешетки воедино.

Все это приведет к большой прочности и жесткости кристалла вольфрама. И действительно, вольфрам является одним из наиболее тугоплавких и твердых элементов.

По тем же причинам электрическое сопротивление кристаллов вольфрама будет довольно большим.

Сведения о кристаллических решетках ряда элементов можно найти, например, в книгах Г. Б. Бокия [4], Х. Штрунца [5] и др.

Анализируя изложенное в этой главе, необходимо отметить следующее.

1. Направления осей симметрии протонных и метонных фигур в ядрах атомов, в гибридизированных электронных оболочках атомов и в кристаллических решетках элементов самосогласованы между собой.
2. В вопросах строения вещества большое значение имеют отношения $2\sqrt{2}/n$, где — n число натурального ряда.

   С одной стороны, в теории фундаментального поля (в теории строения элементарных частиц) встречаются следующие величины: множитель для перехода от частиц к дубль-частицам $2\sqrt{2}/3$, а также тангенсы углов конусов прецессии для устойчивых частиц — $2\sqrt{2}/7$ для электрона и

$2\sqrt{2}/9$ для протона. Другие члены этого числового ряда встречаются у возбужденных элементарных частиц.

С другой стороны, в наиболее распространенных кристаллических решетках, как кубических (примитивной, объемно-центрированной, гранецентрированной и алмазной), так и гексагональной (плотнейшей и некоторых других) встречается полный набор таких отношений.

Это совпадение не случайное. Оно свидетельствует о том, что узлы кристаллических решеток (центры атомов, центры тетраэдрических и октаэдрических пустот) являются точками пересечения ряда протонных и электронных конусов прецессии (конусов анизотропии) элементарных частиц.

3. Электроны проводимости могут занимать центры тетраэдрических или октаэдрических пустот между остовами атомов, играя роль, аналогичную роли анионов [6].

Литература

1. *И. И. Шафрановский.* Алмазы. М.— Л., «Наука», 1964.
2. *Г. О. Гомон.* Алмазы. М.— Л., «Машиностроение», 1966.
3. *К. В. Флинт, Н. В. Слесарева.* Синтез и физические свойства алмаза. М., «Наука», 1965.
4. *Г. Б. Бокий.* Введение в кристаллохимию. М., Изд-во МГУ, 1954.
5. *Х. Штрунц.* Минералогические таблицы. М., Госгортехиздат, 1962.
6. *М. М. Протодьяконов.* Свойства и электронное строение породообразующих минералов. М., «Наука», 1969.

Глава 3

СТРОЕНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ ОБОЛОЧЕК В КРИСТАЛЛАХ МИНЕРАЛОВ

Электронные оболочки в кристаллах сульфидов

Анализ строения кристаллов сульфидов начнем с сульфида железа. Строение ядер и связанное с ним строение электронных оболочек серы и железа было подробно рассмотрено выше.

Атом серы имеет вторую замкнутую торотетраэдрическую электронную оболочку с упакованными на ней шестью внешними электронами третьей оболочки. Четыре из них располагаются против стыков тороидов, образуя тетраэдрическую кремнийобразную оболочку, снаружи которой против центров двух граней этого тетраэдра (против центров внутренних тороидов) размещаются остальные два электрона с довольно большими потенциалами ионизации: 10, 357 и 23,4 *эв*. Сера стремится дополнить свою внешнюю электронную оболочку двумя электронами до замкнутой аргонообразной восьмиэлектронной из двух упакованных один на другом тетраэдров.

Остов атома железа Fe^{2+} представляет собой октаэдрическую хромообразную фигуру. Два внешних электрона располагаются против центров двух граней октаэдра под тетраэдрическими углами один к другому. Они слабее связаны с ядром, чем электроны остова — их потенциалы ионизации составляют всего 7,78 и 16,18 *эв*.

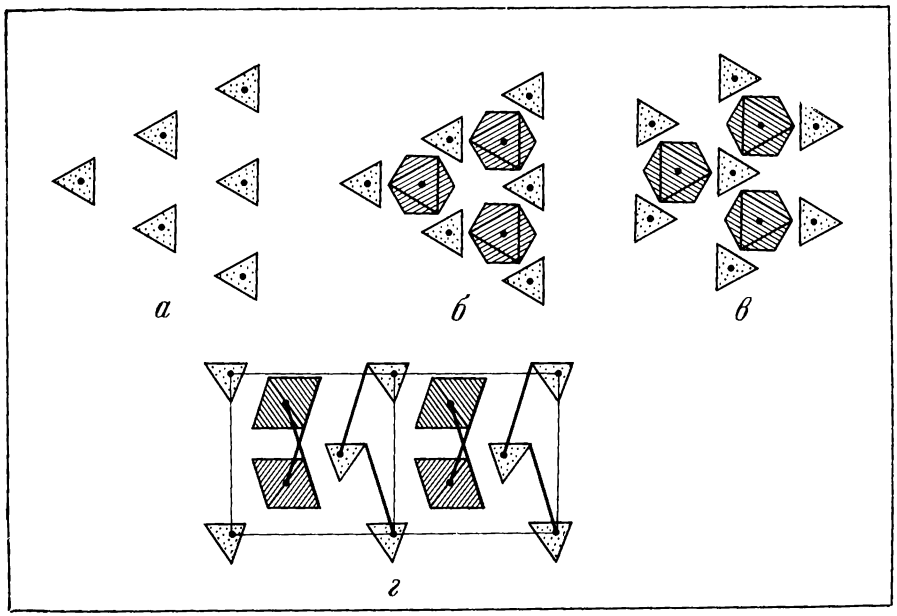


Рис. 1. Электронное строение троилита FeS

а — расположение ионов серы; *б* и *в* — слои FeS в плане; *г* — продольный разрез

В простейшем случае, когда число атомов серы и железа будет одинаковым, каждый атом железа потеряет два электрона, а каждый атом серы их приобретет. Вследствие симметрии ионов Fe^{2+} и S^{2-} сумма магнитных моментов для каждого из них будет равна нулю. Электронов проводимости в таком кристалле нет. В результате получится диамагнитная разность пирротина (троилит).

Для упрощения чертежа в центре каждого электронного облака поместим точку и соединим эти точки прямыми линиями. Тогда ион серы S^{2-} будет иметь вид тетраэдра, а ион железа Fe^{2+} — вид октаэдра.

Рассмотрим прежде всего упаковку анионов серы S^{2-}. На рис. 1, *а* приведена схема одного слоя таких ионов, где вершины тетраэдров направлены к низу и потому не видны. Верхние электроны тетраэдров образуют шестиугольные кольца, т. е. слой ионов серы будет обладать тригональной симметрией. В этом слое будет два вида пустот: по углам расположатся малые треугольные пустоты, в центрах шестиугольников — более крупные. Наиболее компактная упаковка кристалла получится, если ионы железа попадут именно в эти крупные пустоты, как это показано на рис. 1, *б*. При упаковке сверху второго такого же парного слоя анионов серы и катионов железа обращенные книзу вершины серных тетраэдров должны будут войти в пустые промежутки между октаэдрами железа. В результате парный слой сверху окажется повернутым вокруг тройной оси симметрии, перпендикулярной к плоскости чертежа, на 60° (рис. 1, *в*). Дальше картина упаковки повторится. В результате возникнет тригональная решетка, в которой ионы серы образуют плотнейшую двухслойную гексагональную упаковку, а ионы железа, располагаясь в октаэдрических пустотах этой решетки, разместятся

один над другим в зеркальном положении по углам тригональной призмы. Вертикальный разрез через две смежных ячейки показан на рис. 1, *г*.

Чтобы тройные оси симметрии октаэдрического иона железа и лежащего выше тетраэдрического иона серы совпадали, ионы железа должны расположиться не в середине высоты октаэдрической пустоты между ионами серы, а на $^1/_{16}$ высоты ячейки выше. При этом верхний слой электронов серы окажется точно посередине между смежными слоями электронов ионов железных октаэдров. Такое смещение по вертикали действительно наблюдается в троилите, но логично объяснить его с позиций обычных теорий плотных упаковок из шарообразных атомов не удавалось. При учете же формы электронных оболочек ионов железа и серы это их взаимное расположение получается само собой.

Проведя протонные конусы анизотропии относительно вертикальных тройных осей симметрии, заметим, что на них попадают центры электронных облаков соседних ионов железа и серы. То же относится и к наклонным осям симметрии октаэдров и тетраэдров, но, чтобы не загромождать чертежа, эти конусы анизотропии не показаны.

Очевидно, что совершенно аналогичная решетка может быть получена при направлении вершин тетраэдрических ионов серы не книзу, а кверху. Поэтому кристаллы троилита будут давать двойники, являющиеся их зеркальным отражением в плоскости, перпендикулярной к тройной оси симметрии кристалла. В плоскости стыка двойников октаэдрические ионы железа будут окружены шестью анионами серы. Расположение центров ионов в плане останется прежним, однако три тетраэдра будут направлены вершинами книзу, а три — вершинами кверху.

Более подробный анализ полученной решетки показывает, что в ней имеются интенсивно заселенные ионами плоскости, расположенные под углом почти 45° к тройной оси симметрии кристалла. По этой плоскости также может произойти двойникование кристалла. Если бы упомянутый угол был равен точно 45°, то можно было ожидать крестообразного расположения четырех двойников. При небольшом отклонении от 45° получится тройник Т-образной формы.

Поскольку ионы серы и железа в троилите имеют замкнутые электронные оболочки, электронов проводимости в кристалле троилита не будет, и потому он не должен обладать электропроводностью.

Рассмотрим теперь пирротин с дефектной структурой, т. е. при нехватке атомов железа. В этом случае для заполнения электронных оболочек всех атомов серы до замкнутых восьмиэлектронных аргонообразных часть атомов железа должна потерять не по два, а по три электрона. Таких ионов должно получиться вдвое больше, чем число отсутствующих атомов железа. Эти ионы примут форму тетрагональной пирамиды (октаэдра без одного угла). Они будут обладать магнитными моментами, так как моменты электронов в противоположных углах октаэдров из-за появившейся асимметрии останутся нескомпенсированными.

Асимметричные ионы железа Fe^{3+}, обладающие магнитными моментами, вероятнее всего, расположатся в таких же местах, что и немагнитные ионы Fe^{2+}. При этом ось момента, направленная, по двойной оси симметрии бывшего октаэдра L_4^2, будет составлять половину тетраэдрического угла (54°44′) к тройной оси симметрии L^3, нормальной к сетке из тетраэдрических ионов серы.

Нехватка части атомов железа и наличие тройных его магнитных ионов приведет в ряде случаев к образованию сверхструктуры с увеличением в $\sqrt{3}$ раз параметров ячейки, в которой эти особенности должны быть расположены наиболее симметрично. В этом случае все горизонтальные проекции моментов будут скомпенсированы, а вертикальные — сложатся и дадут слагающую по тройной оси симметрии кристалла для каждого слоя ионов железа.

Для троилита FeS все слои из атомов железа, так же как и для серы, являются гексагональными. Для всех дефектных пирротинов химическая формула будет $Fe_{n-1}S_n$, где n — число атомов серы в одном слое элементарной ячейки. Расположив наиболее симметрично и равномерно вакансии для атомов железа в гексагональном слое, можно найти размеры и форму ячейки для таких пирротинов. (При изменении величины n сингония и параметры ячейки каждый раз изменяются скачками.) Затем в соответствии с получившейся симметрией ячейки в ней следует симметрично разместить магнитные атомы железа и затем так же симметрично ориентировать их моменты.

Дальше для упрощения схемы каждый атом железа изображается одним кружком. Вакансию изобразим пустым кружком, магнитный атом темным, а немагнитный — светлым.

Так (рис. 2), для Fe_2S_3 на каждую ячейку в слое придется одна вакансия и два магнитных атома железа. Слой ионов железа получится гексагональным из шестиугольных колец. Чтобы симметрично расположить в таком слое магнитные моменты, их нужно взять не 2, а в 3 раза больше, что приведет к появлению сверхструктуры и увеличению параметра ячейки в $\sqrt{3}$ раз. Для такой ячейки симметрия будет уже не гексагональной, а тригональной.

Для Fe_3S_4 на каждую ячейку в слое придется одна вакансия, два магнитных атома железа и один — немагнитный. Размер ячейки увеличится в $\sqrt{4/3}$ раз. На рисунке показан случай без сверхструктуры, когда магнитные атомы расположатся рядами и их магнитные моменты будут повернуты в одну и ту же сторону. Это сделает слой ферромагнитным, а кристалл — ромбическим. Если же возникнет сверхструктура из групп атомов $3Fe_3S_4$, то магнитная симметрия снова станет тригональной.

Для Fe_4S_5 в каждой ячейке в слое будет находиться два магнитных и два немагнитных атома железа (дальше вакансию мы упоминать не будем, но забывать о ней не должны). Вследствие этого данный слой потеряет тригональную симметрию и станет моноклинным, а все магнитные моменты окажутся направленными в одну сторону, что придаст слою ферромагнитные свойства. Из-за потери слоем тригональной симметрии никакая сверхструктура не сможет обеспечить тригональную симметрию моментов. Подобный пирротин действительно кристаллизуется в моноклинной сингонии и отличается ферромагнетизмом.

Для Fe_5S_6 число немагнитных атомов в слое на одну элементарную ячейку дойдет до трех. Симметрия слоя получится ромбической, и все моменты будут повернуты в одну сторону.

Для Fe_6S_7 это число будет 4, и, хотя по расположению центров атомов слой будет тригональным, размещение магнитных ионов и ориентировка их моментов приведут к снижению симметрии до моноклинной и к сильному ферромагнетизму слоя. Однако может возникнуть и сверхструктура, когда в ячейке слоя располагается не одна, а три формульных единицы $3Fe_6S_7$.

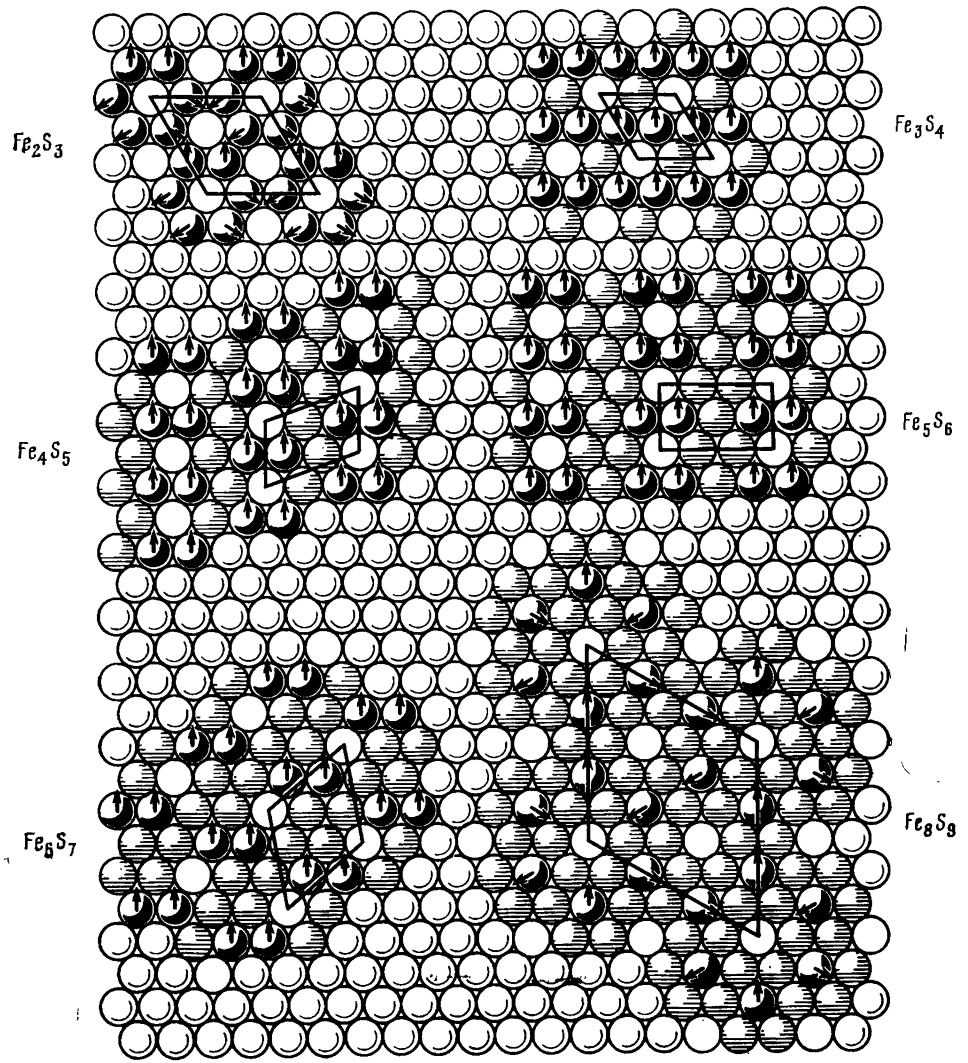


Рис. 2. Схема строения дефектного слоя ионов железа в пирротине

При этом слой сохранит тригональную симметрию, но параметр ячейки возрастет в $\sqrt{3}$ раз.

Зато для Fe_8S_9 слой железных ионов обладает тригональной симметрией и сверхструктура будет иметь чисто магнитную природу, так как тройные оси симметрии в элементарных ячейках получатся трех типов: с радиальным расположением моментов и с ориентировкой их по часовой стрелке и против нее.

Расчет показывает, что тригональная сверхструктура возможна только для пирротинов с 3, 4, 7, 9, 12, 13, 16, 19, 21, 25, 27, 28, 31, 36 и т. д. атомами серы в элементарной ячейке.

Из-за ограниченного объема книги проанализировать все многочисленные модификации дефектных пирротинов не представляется возможным. Следует только указать, что с увеличением n в формуле $Fe_{n-1}S_n$ число немагнитных атомов в ячейке увеличивается и магнитные свойства пирротинов уменьшаются. Таким образом, на первый взгляд получается парадоксальное явление — чем меньше в пирротине железа, тем он более магнитен, что и наблюдается в действительности.

Кроме того, в разных слоях ионов железа и серы направление вращения электронов может быть прямо противоположным, и потому в каждом ионе моменты могут быть направлены от центра и к центру. Вакантные места электронов в ионах могут быть расположены либо сверху, либо снизу ионов. Тогда проекции нескомпенсированных моментов на вертикальную ось симметрии могут быть направлены либо кверху, либо книзу. Если эти проекции в разных слоях направлены в одну сторону, то появится ферромагнетизм, если — в противоположные, то возникнет антиферромагнетизм. Возле каждого вакантного места атома железа внешние электроны анионов серы окажутся расположенными очень близко один к другому, что не будет скомпенсировано положительным зарядом отсутствующего иона. Это приведет к сильному взаимному отталкиванию электронов. Они могут быть вытолкнуты из этого места и занять места минимальной экранировки у атомов железа. Это вызовет появление электропроводности пирротина и вклад электронов проводимости в магнитный момент кристалла. Кроме того, асимметричные ионы серы также приобретут нескомпенсированный магнитный момент.

Из изложенного следует, что магнитные свойства пирротинов могут быть весьма разнообразными, так же как их симметрия и параметры решетки, пропорциональные $\sqrt{n}$. Все это наблюдается в действительности.

Далее рассмотрим строение кристалла пирита FeS_2. Каждый атом железа легко потеряет по два внешних электрона, превратившись в октаэдрический ион Fe^{2+}. Но этого не хватит для заполнения электронных оболочек всех атомов серы до замкнутых — аргонообразных. Для этого сера должна была бы оторвать от каждого атома железа не по два, а по четыре электрона, на что потребовалось бы около 53 *эв*. Но у серы не хватит энергии. Поэтому она вынуждена будет использовать в своей оболочке без отрыва от железа электроны его хромоподобного остова. Эти электроны будут совместно принадлежать и железу, и сере.

Отдавая по одному электрону в общее пользование с каждым ионом серы, ион железа сможет окружить себя шестью ионами серы. Вследствие двойного числа ионов серы по сравнению с железом каждый ион серы приобретет по три электрона и соответственно окружит себя тремя ионами железа. Но тогда один из собственных электронов серы окажется лишним и попадет в число электронов проводимости. Таким образом, каждый ион серы в итоге приобретает по $3 - 1 = 2$ электрона и замкнет свою электронную оболочку до аргоноподобной. Тремя угловыми электронами сера будет связана с тремя окружающими ионами железа, а четвертый угловой электрон останется неподеленным.

Для построения кристаллической решетки пирита следует воспользоваться октаэдрическими ионами железа Fe^{2+}. Наиболее компактно такие ионы можно упаковать, располагая ребра октаэдров одно против другого. Тогда каждый из ионов будет окружен двенадцатью такими же соседями. При этом получится кубическая гранецентрированная решетка с четырьмя ионами железа на каждую ячейку.

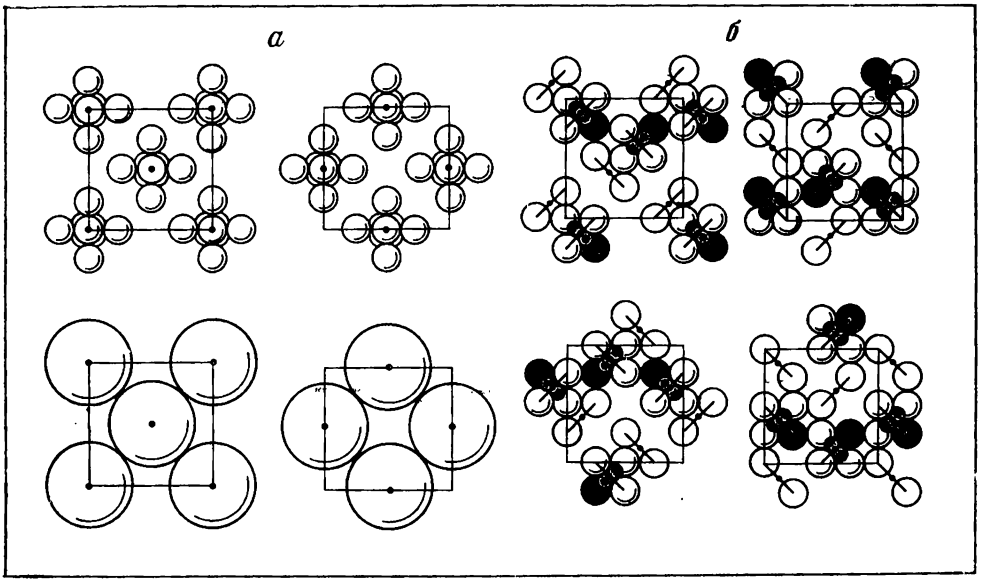


Рис. 3. Схема электронного строения кристалла пирита в плане
а — упаковка ионов Fe^{2+}; *б* — упаковка ионов серы S^{2-}

На рис. 3, *а* показаны два слоя упаковки в нашей интерпретации и в общепринятой шаровой упаковке. Рентгеноструктурный анализ подтверждает такое расположение центров ионов железа.

В подобной решетке будет по 8 тетраэдрических пустот, расположенных по углам малого куба с ребром вдвое меньшим, чем у элементарной ячейки. Четыре октаэдрические пустоты на ячейку расположатся в ее центре и по серединам ее ребер.

Восемь ионов серы не могут расположиться в центрах восьми тетраэдрических пустот, так как тогда для них координационное число было бы равно не 3, а 4. Но разместить их в четырех октаэдрических пустотах по два иона в каждой также невозможно из-за малых размеров этих пустот. Единственно возможное расположение ионов серы будет между октаэдрическими и тетраэдрическими пустотами вдоль тройных осей симметрии, проходящих через эти пустоты. В первом приближении, разделив расстояние между октаэдрическими и тетраэдрическими пустотами пополам, получим, что центры ионов серы должны будут отстоять от центров октаэдрических пустот на $^1/_8$ диагонали куба или на 0,375 ее длины от иона железа в углу ячейки. Более точно эту координату можно определить в точке пересечения трех метонных конусов анизотропии ядер железа с тройной осью симметрии элементарной ячейки. Расчет дает величину 0,388 от угла ячейки. Опытным путем по рентгенограммам, методом проб и ошибок это расстояние было определено в 0,386 от длины пространственной диагонали куба, что дает очень хорошее совпадение с опытом. Существующие теории твердого тела вообще не дают возможности расчетным путем найти эту координату центра иона серы. Для описанной решетки вид симметрии получается дидодекаэдрический, группа симметрии T_h^6 по Шенфлису, или $Pa3$, по международным обозначениям.

Если рассматривать только один октаэдр из шести ионов железа, то два иона серы расположатся по одной из тройных осей симметрии перпендикулярно к двум его противоположным граням, оба будут обращены один к другому своими треугольными гранями, углы которых являются общими с тремя ближайшими ионами железа. Неподеленные электроны ионов серы будут лежать на тройной оси симметрии в центре тетраэдрической пустоты. Получится, что длины ребер октаэдров железа и тетраэдров серы будут одинаковыми. Оба иона серы повернутся один относительно другого вокруг тройной оси симметрии на 180°, т. е. в центре октаэдрической пустоты окажется центр инверсии кристалла.

Расстояние между двумя смежными ионами серы в первом приближении составляет $^1/_4$ длины пространственной диагонали куба, а более точно, с учетом пересечения метонных конусов анизотропии, это расстояние получится равным $^2/_9$, или 0,223, длины диагонали. Использовав из опыта размер ребра ячейки пирита 5,405 Å, получим расстояние между центрами пары ионов серы 2,09 Å, что практически совпадает с межатомными расстояниями в молекулах серы (2,10 Å).

В первом приближении все ионы серы расположатся в кубической ячейке пирита в виде четырех слоев на высоте $^1/_8$, $^3/_8$, $^5/_8$ и $^7/_8$ от длины ребер куба. Их тройные оси симметрии пройдут через центры октаэдрических пустот (через центр ячейки и через середины ее ребер), но не пересекутся в пространстве. Таким образом, направления тройных осей симметрии ионов серы, ионов железа и всей кристаллической ячейки будут параллельными. На каждый из упомянутых слоев придется по два иона серы на ячейку.

На рис. 3, *б* показаны четыре слоя элементарной ячейки пирита с размещением только серных тетраэдров. Электроны, принадлежащие одновременно ионам железа и серы, изображены светлыми, а неподеленные электроны ионов серы — более темными (их втрое меньше). Электроны, лежащие на верхнем ребре каждого серного тетраэдра, соединены между собой отрезком прямой линии. В каждом слое пустыми кружками показаны также электроны, лежащие на нижнем ребре расположенного выше тетраэдра. Таким образом, видно, что ионы серы в разных слоях как бы цепляются один за другой.

В каждом слое имеется по две различные ориентировки серных тетраэдров. В проекции на грань куба они выглядят повернутыми на 90°. В четных слоях ребра тетраэдров разных слоев располагаются по сторонам ромбов, а в нечетных — по сторонам квадратов. На рис. 4, *а* и *б* изображен диагональный разрез ячейки пирита и план ее центрального октаэдра в виде октаэдрических ионов железа и тетраэдрических ионов серы.

Рассмотрим теперь вероятное распределение в ячейке электронов проводимости. От каждого атома железа будет оторвано по 2 электрона и от каждого атома серы — по 1 электрону, а всего — по 4 электрона проводимости на одну формульную единицу. На четыре формульные единицы элементарной ячейки придется 16 электронов проводимости, а на каждую пару атомов серы — по 4 таких электрона. Для сохранения общей симметрии кристалла эти электроны должны будут разместиться в плоскостях, проходящих посередине между каждой парой ионов серы, перпендикулярно к соединяющей их тройной оси симметрии. Такому расположению соответствует один электрон на данной оси в октаэдрической пустоте ячейки и три других — вокруг нее под углом 120° один к другому. Если провести в кристалле такие плоскости, то получится, что они заполнятся электронами проводимости, но вакантных мест для них вокруг каждой тройной оси сим-

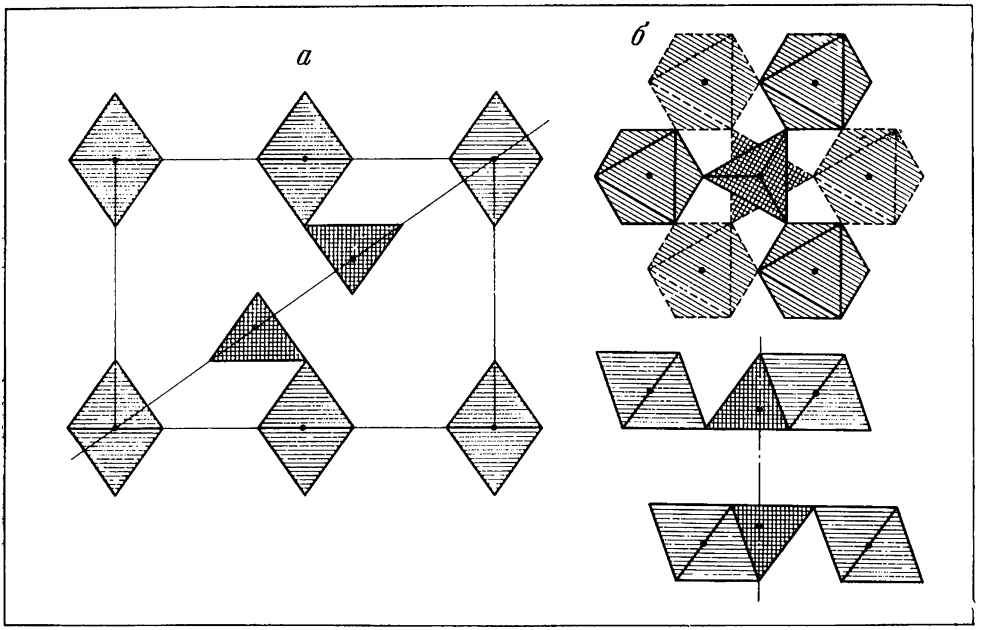


Рис. 4. Схема электронного строения пирита
а — разрез по диагонали; *б* — разрез перпендикулярно к тройной оси симметрии

метрии будет не три, а шесть. Это значит, что 50% времени электроны проводимости будут занимать одну тройку положений, а вторые 50% — вторую тройку положений. Вероятнее всего, каждые три электрона проводимости будут вращаться вокруг своей тройной оси симметрии. Из-за симметричного расположения тройных осей симметрии геометрическая сумма этих орбитальных моментов будет равна нулю.

Анализируя строение электронных оболочек в кристалле пирита, можно сделать следующие замечания.

1. Зная числа электронов и строение электронных оболочек атомов железа и серы, углы конусов анизотропии, удалось определить сингонию (кубическую), вид симметрии (дидодекаэдрический) и группу симметрии (T_h^6, по Шенфлису, и $Pa3$ по международным обозначениям), а также число формульных единиц в ячейке (4) и координаты центров атомов не только для железа (точно в узлах ячейки), но и для серы (по расчету, 0,388 и, по замеру, 0,386 от длины пространственной диагонали ячейки). Все расчетные данные совпадают с опытом.

2. Определены также наиболее вероятные центры электронных облаков для 24 электронов, общих для железа и серы, и восьми неподеленных электронов серы. Найдены вероятные координаты центров тяжести электронных облаков проводимости (четыре — посередине между каждой парой ионов серы в октаэдрических пустотах и 12 — в промежутках между электронами, общими для ионов железа и серы). Найдены вероятные направления орбитального движения этих электронов вокруг четырех непересекающихся тройных осей симметрии кристалла. Наличие электронов проводимости

должно приводить к электропроводности и металлическим свойствам, а также к непрозрачности кристаллов пирита, что и наблюдается в действительности. Наибольшую электропроводность следует ожидать вдоль слоев электронов проводимости, перпендикулярных к четырем тройным осям симметрии. Это предсказание нуждается в опытной проверке.

3. Все остовы ионов железа и серы симметричны и потому не должны создавать в кристалле суммарных магнитных моментов. Четыре группы электронов проводимости должны иметь орбитальные и спиновые моменты, направленные по четырем тройным осям симметрии кристалла под тетраэдрическими углами один к другому. Сумма четырех таких моментов должна равняться нулю.

Каждый электрон связи между железом и серой может вращаться вокруг осей симметрии ионов железа либо серы, на что может оказывать влияние внешнее магнитное поле. Поэтому кристалл пирита должен быть парамагнитным, что и наблюдается в действительности.

4. Строение элементарной ячейки пирита должно приводить к кристаллизации его в виде кубов или пентагон-додекаэдров с символами граней (210). Наличие зигзагообразных цепочек из ионов серы и электронов проводимости, вытянутых параллельно ребрам куба, может приводить к появлению штрихов на гранях куба или пентагон-додекаэдра, вытянутых в трех взаимно перпендикулярных направлениях, что и наблюдается в действительности.

Как известно, наряду с пиритом существует вторая полиморфная модификация двойного сульфида железа — марказит. Почему это так, существующие теории объяснить не могут.

В кристалле пирита тетраэдрические ионы серы были ориентированы один к другому своими гранями и между ними помещался электрон проводимости. Посмотрим, что получится, если эти ионы соединить через общую вершину. В этом случае электроны противоположных граней серных тетраэдров попадают на конусы анизотропии метонов ядер соседних ионов. Это приведет к тому, что оба иона вытянутся в одну линию вдоль тройной оси симметрии. Связанные с серой октаэдрические ионы железа расположатся в кристалле не вертикально, как в пирите, а наклонно, причем наклон их в смежных слоях будет в разные стороны.

На рис. 5, *а* полученная ромбическая ячейка марказита изображена в трех проекциях. Ионы железа размещаются по ее углам и в центре, образуя объемно-центрированную ячейку. Ионы серы располагаются между ионами железа попарно относительно центров симметрии на части граней и ребер ячейки. Ионы серы будут ориентированы в ячейке четырьмя способами. Центры ионов железа и серы обозначены черными кружками.

Каждый ион железа оказывается в окружении шести ионов серы, центры которых образуют вокруг него наклонный октаэдр. Каждый ион серы окажется в окружении трех ионов железа (два по углам и один в центре ячейки или наоборот, что соответствует химической формуле FeS_2). Кроме того, каждый ион серы четвертым своим углом будет связан с парным ему ионом серы.

Баланс электронов получится следующий. Каждый атом железа отдаст в зону проводимости по два электрона, а шесть электронов остова разделит с шестью соседними ионами серы. Каждый ион серы получит в общее пользование от смежных остовов железа по три электрона, и потому один электрон в его оболочке окажется лишним (тот, который имеет минимальный потенциал ионизации: 10,357 *эв*). Кроме того, на стык каждых двух ионов

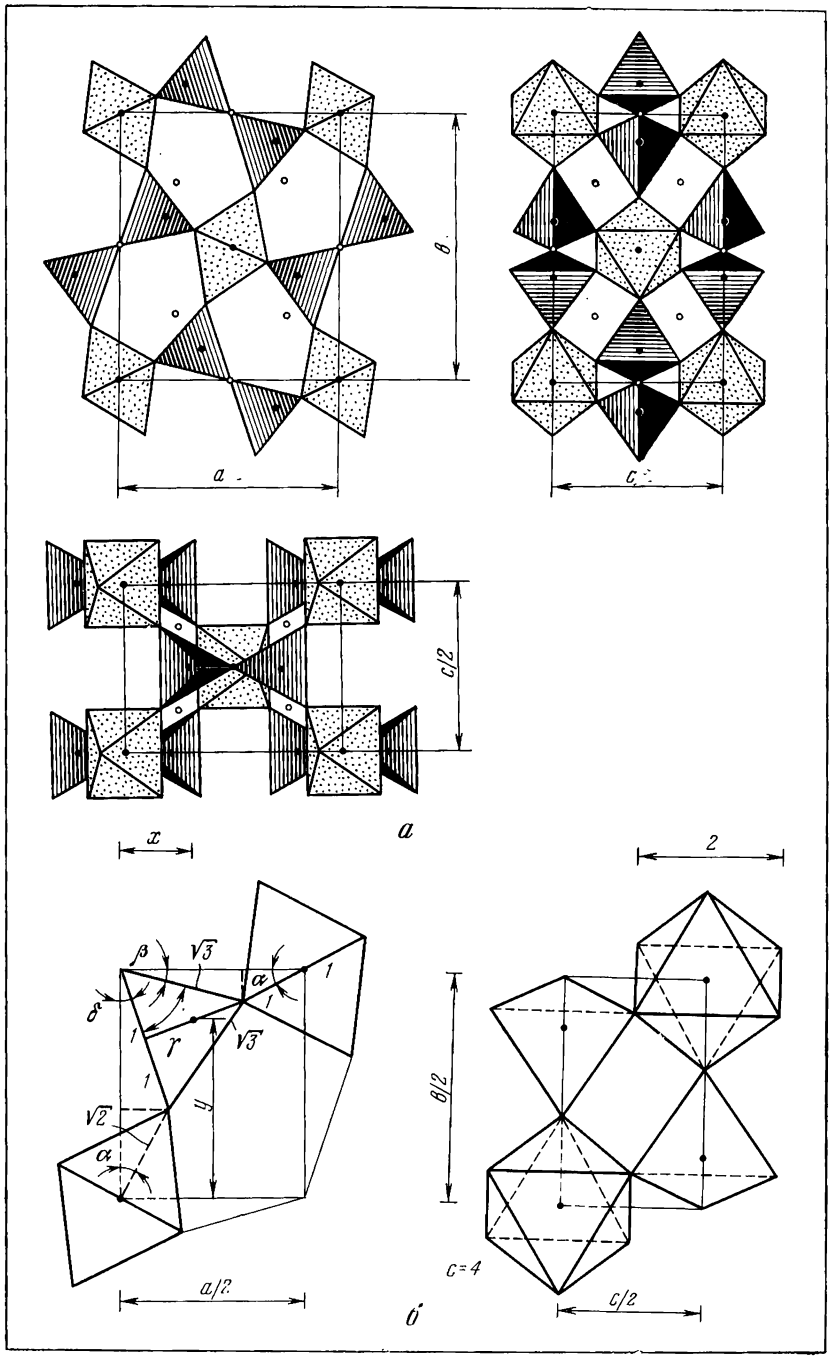


Рис. 5. Схема электронного строения марказита FeS_2

а — схема ячейки; *б* — схема расчета углов наклона ионов железа и серы

серы попадают по 2 электрона, а разместиться там сможет только один. Поэтому в зону проводимости от каждой молекулы FeS_2 перейдет по $2 + (1 \times 2) + 1 = 5$ электронов. Так как в объемно-центрированной ячейке помещаются две формульные единицы, всего в ней будет 10 электронов проводимости. Наиболее вероятные места расположения этих электронов следующие:

	Число электронов
Внутри ячейки в пустотах между ионами железа и серы	8
На серединах горизонтальных ребер ячейки $4 \cdot {}^1/_4$	1
В центрах двух боковых граней ячейки $2 \cdot {}^1/_2$	1
Итого	10

Эти места обозначены на рис. 5, *а* светлыми кружками.

Рассчитаем теперь наиболее вероятные соотношения размеров ячейки и координаты в ней электронов связи между атомами. На рис. 5, *б* изображена одна восьмая часть элементарной ячейки марказита в двух проекциях. Примем длину ребра электронного октаэдра вокруг ядра железа за две единицы. Тогда для получения неискаженного электронного тетраэдра вокруг иона серы его ребро также должно быть равно двум единицам. Прочие размеры полиэдров указаны на рисунке.

Обозначим неизвестные заранее углы поворота октаэдров и тетраэдров относительно ребер ячейки через α, β, γ и δ. Составим тригонометрические уравнения для определения этих углов:

$$\sin(\beta + \delta) = \frac{1}{\sqrt{3}},$$

$$\sin\beta = \frac{\sin\alpha}{\sqrt{3}},$$

$$\sin\delta = \frac{\sin\alpha}{\sqrt{2}}.$$

Откуда

$$\sin\alpha = \frac{\sqrt{2}}{3}, \qquad \cos\alpha = \frac{\sqrt{7}}{3};$$

$$\sin\beta = \frac{\sqrt{2}}{3\sqrt{3}}, \qquad \cos\beta = \frac{5}{3\sqrt{3}};$$

$$\sin\delta = \frac{1}{3}, \qquad \cos\delta = \frac{2\sqrt{2}}{3}.$$

Относительные размеры ребер элементарной ячейки будут равны:

$$a/2 = \frac{5+\sqrt{7}}{3} = 2{,}55, \quad b/2 = \frac{\sqrt{2}\,(4+\sqrt{7})}{3} = 3{,}13, \quad c/2 = 2 = 2{,}00.$$

Эмпирические размеры ячейки равны: $a = 4{,}435$ Å, $b = 5{,}414$ Å и $c = 3{,}381$ Å. Отношения теоретических и эмпирических размеров ребер ячейки марказита получились практически одинаковыми, а именно: 0,820 : 1,00 : 0,637 и 0,819 : 1,00 : 0,626.

Относительные координаты центров ионов серы получаются в долях от соответствующих ребер ячейки: $x = 0{,}196$ и $y = 0{,}387$ при эмпирических значениях — соответственно 0,200 и 0,378. Следовательно, ошибка в рас-

чете координат атома серы составляет всего около 1% от размера ребра ячейки.

Таким образом, базируясь на строении электронных оболочек атомов и ионов железа и серы, удается найти строение электронных оболочек в элементарной ячейке марказита. При этом достигнуты следующие результаты.

1. Теоретически вычисленная группа симметрии кристалла совпала с найденной эмпирически.

2. Теоретически вычислены отношения размеров ребер ромбической ячейки, совпадающие с опытом. Существующие теории провести такой расчет не позволяли.

3. Впервые теоретически удалось вычислить координаты ионов серы в ячейке, практически совпадающие с опытом.

4. Показано, что наличие электронов проводимости должно вести к появлению электропроводности в кристалле и к поглощению световых лучей, что соответствует опытным данным.

5. Удалось показать, что из одних и тех же атомов и ионов железа и серы можно построить не только кубические кристаллы пирита, но и ромбические кристаллы марказита. Существующие теории вообще не могли объяснить этот экспериментальный факт.

Рассмотрим теперь сульфиды цинка ZnS.

Ядро цинка состоит из 64 ядерных протонов и 34 метонов. Протонная фигура представляет собой куб, усеченный двумя разными тетраэдрами без четырех протонов в центрах малых тетраэдрических граней. Все протоны могут быть разбиты на четыре группы, в каждой из которых оси конусов анизотропии ориентированы параллельно одной из четырех тройных осей симметрии ядра. Метонная фигура — тетраэдр со стороной из пяти метонов без центрального метона. В ней наряду с конусами анизотропии, ориентированными параллельно тройным осям симметрии, есть также конусы, направленные по трем двойным осям симметрии ядра.

Электронный остов атома цинка представляет собой четыре электрона, расположенные по углам тетраэдра, упакованные на шестерке электронов, образующих октаэдр. Все вместе они образуют тетраэдрическую никельобразную оболочку, каждая грань которой состоит из шести электронов. Таким образом, симметрия этой фигуры вполне отвечает симметрия ядра цинка. Вследствие симметрии эта оболочка не имеет суммарного момента, т. е. является диамагнитной. Поверх этого остова, против центров двух из четырех его граней упакованы два внешних электрона. Их потенциалы ионизации составляют 9,304 и 17,964 *эв*. Для ионизации четырех электронов никельобразного остова требуется от 39,70 до 108 *эв*, т. е. много больше Поэтому атом цинка легче всего теряет только два своих внешних электрона и, следовательно, является двухвалентным.

Описанные атомы серы имеют сильное сродство к электрону и поэтому дополняют свою электронную оболочку двумя электронами, оторванными от атома цинка. После этого ион серы S^{2-} приобретает восьмиэлектронную, дважды тетраэдрическую аргонообразную форму. Полученный тетраэдрический ион вследствие своей симметрии также диамагнитен.

При тетраэдрической форме иона цинка Zn^{2+} и иона серы S^{2-} наиболее вероятно, что каждый из них будет стремится окружить себя четырьмя соседями противоположного знака, расположенными по тетраэдру. При этом образуются две гранецентрированные кубические подрешетки для каждого

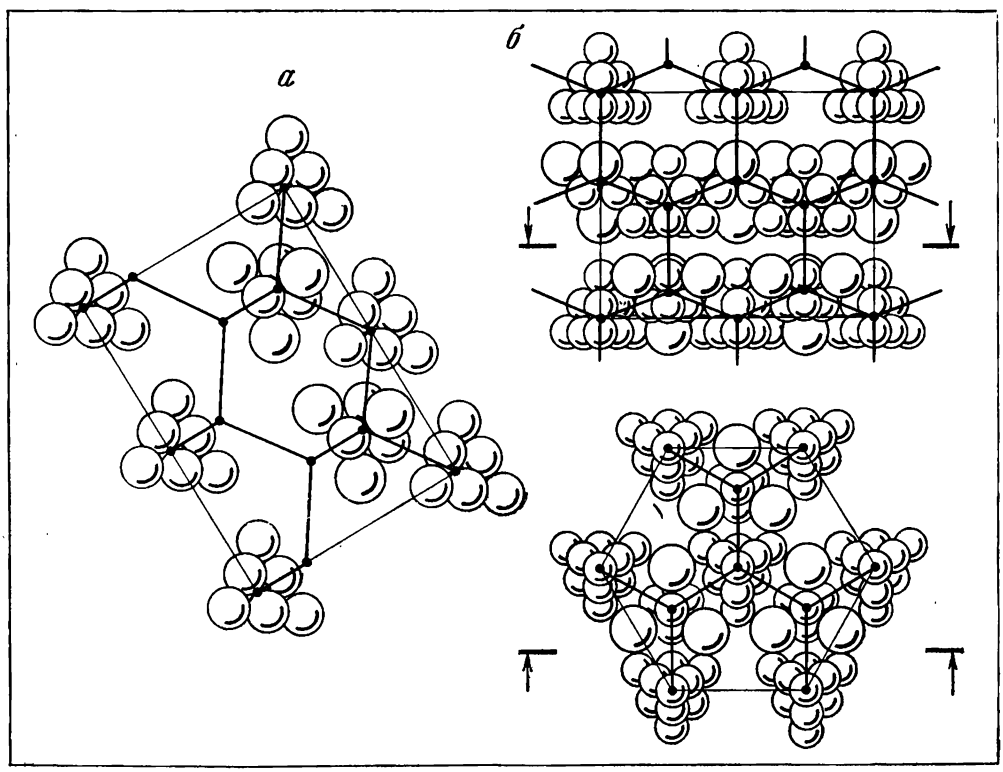
типа ионов. Ионы противоположного знака будут занимать 50% тетраэдрических пустот. Вместе они образуют решетку типа алмазной. Ввиду того, что свободных электронов проводимости в такой решетке нет, следует ожидать, что полученный кристалл не будет проводить электрический ток и окажется прозрачным. Форма электронных оболочек в таком кристалле показана на рис. 6, *а*. Из опыта известно, что кристаллы сфалерита без примесей действительно имеют описанную кристаллическую решетку, являются прозрачными (клейофан) и не проводят электрического тока.

Подобные кристаллы образуются в том случае, когда все атомы цинка имеют одно и то же направление вращения электронов, если смотреть на каждый из них по направлению к ядру. То же относится и к атомам серы.

Однако в природе с равной вероятностью могут встречаться и атомы с противоположными направлениями вращения электронов: они образуют кристаллы-двойники.

Если же кристаллизация произойдет из смеси атомов с правым и левым вращением электронов, то кристалл будет состоять из чередующихся слоев правых и левых атомов. Это неизбежно приведет к утрате кубической симметрии кристаллов. В каждом следующем слое атомы будут повернуты на 180° относительно атомов соседнего слоя (рис. 6, *б*). Именно таким образом

Рис. 6. Схема электронного строения сульфидов цинка
а — сфалерит; *б* — вюрцит



получаются гексагональные кристаллы вюрцита. По физическим свойствам, за исключением симметрии, они не отличаются от сфалерита.

В качестве последнего примера сульфидных минералов кратко рассмотрим сульфид свинца PbS, или галенит. Свинец обладает симметричным тетраэдрическим платинообразным остовом, на котором против центров граней тетраэдра упаковано 4 внешних электрона. Два из них уйдут на заполнение внешней электронной оболочки атома серы. Но тогда двойной ион свинца получится менее симметричным. Это приведет к тому, что он должен будет отдать еще два электрона в зону проводимости. Тогда ионы свинца Pb^{4+} и серы S^{2-} смогут образовать две проникающие одна сквозь другую кубические плотнейшие подрешетки, где на одну элементарную ячейку будет приходиться по 4 атома каждого из элементов. Они могут сочленяться двумя способами, взаимно занимая либо октаэдрические, либо половину тетраэдрических пустот. При решении вопроса о том, какая же схема возобладает, необходимо учесть и возможность симметричного размещения электронов проводимости, которых имеется по 8 штук на ячейку. Следовательно, все восемь тетраэдрических пустот будут заняты электронами проводимости, а все четыре октаэдрические пустоты — ионами серы в пустотах упаковки из ионов свинца и ионами свинца в пустотах между ионами серы. В результате возникнет решетка типа каменной соли, где тетраэдрические ионы будут окружены шестью ближайшими ионами противоположного знака. Восемь электронов проводимости при этом расположатся по углам малого куба, со стороной, вдвое меньшей стороны элементарной ячейки. На рис. 7, *а* и *в* показано электронное строение элементарной ячейки кристалла галенита в диагональной плоскости и в плоскости, перпендикулярной к одной из тройных осей симметрии кристалла. Вследствие наличия электронов проводимости галенит должен быть электропроводным, обладать металлическими свойствами и не пропускать света, что и подтверждается на опыте.

Мы не будем приводить анализ строения более сложных сульфидов, в которые входят не два, а три и более различных элементов, например халькопирита $CuFeS_2$ или пентландита $(FeNi)_9S_8$ и др. Упомянем только, что наряду с наиболее известной тетрагональной модификацией халькопирита нам удалось расшифровать и его кубическую модификацию. В первой из них атомы железа и меди в плоскости, перпендикулярной к четверной (двойной) оси симметрии, располагаются в шахматном порядке, а во второй — по диагоналям куба, из-за чего параметр ячейки удваивается. Причина этого заключается в том, что в тетрагональном халькопирите имеются два сорта ионов меди, отличающихся только направлением вращения электронов, поэтому одни ионы меди обращены к ионам серы своими углами, а другие — гранями. В кубическом же кристалле халькопирита направление вращения электронов во всех ионах меди одинаковое. Поэтому кристалл получается кубическим, но зато возможно появление двойников.

Для пентландита нам удалось показать, что вместо формулы $(FeNi)_9S_8$ целесообразнее писать $Fe_4Ni_5S_8$, а также указать наиболее вероятные места электронов проводимости.

Обобщая все изложенное относительно электронного строения сульфидов различных металлов, необходимо заметить следующее.

1. Ряд сульфидов имеет по нескольку полиморфных модификаций. Так, наблюдается ряд пирротинов состава $Fe_{n-1}S_n$ с дефектной структурой, у которых нехватка одного атома железа в ячейке приводит к появлению двух магнитных ионов железа Fe^{3+}, причем в зависимости от величины n меняется

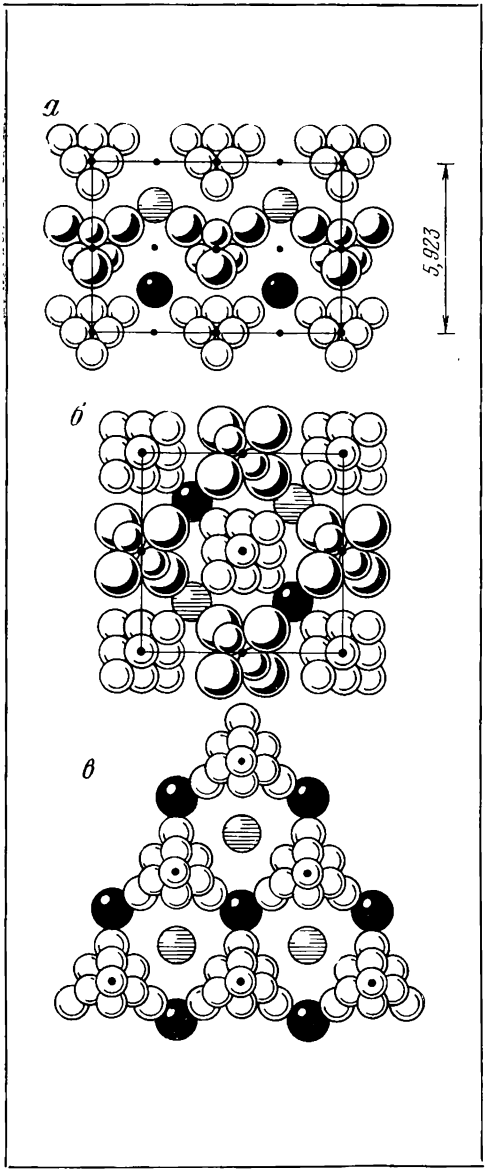


Рис. 7. Схема электронного строения галенита PbS
а — диагональный разрез;
б — вид по двойной оси симметрии;
в — вид по тройной оси

не только удельный вес, но и сингония (моноклинный и гексагональный пирротин, сверхструктура), параметры ячейки, тип магнетизма и электропроводность. Двойной сульфид железа FeS_2 в зависимости от направления вращения электронов в ионах серы S^{2-} дает разную стыковку этих тетраэдрических ионов (грань к грани или общую вершину). В первом случае возникает кубический пирит, а во втором — ромбический марказит.

В зависимости от той же причины образуется кубический сфалерит или гексагональный вюрцит. Разное направление вращения электронов в ионах меди приводит к образованию тетрагональной и кубической модификации халькопирита.

2. Наблюдается явная самосогласованность между симметрией протонных и метонных фигур в ядрах элементов, строением их электронных оболочек и строением и симметрией образованных из этих элементов кристаллов.

3. Электронные остовы атомов обычно получаются в виде симметричных фигур — тетраэдров или октаэдров из электронов. Наличие внешних электронов у ряда одиночных атомов: железа, серы, меди, цинка — понижает их симметрию, однако при объединении этих атомов в кристалл ряд электронов обобществляется и симметрия атомов в кристалле снова повышается.

4. Удалось показать, что электроны проводимости располагаются в кристалле не беспорядочно, а преимущественно в центрах тетраэдрических или октаэдрических пустот между атомами, играя роль, аналогичную роли анионов. Симметрия расположения электронов проводимости самосогласуется с общей симметрией кристаллической решетки и формой остовов атомов.

5. Выяснилось, что симметричные ионы разных знаков могут стыко

ваться: а) без помощи электронов проводимости (троилит, сфалерит, вюрцит), причем их оси симметрии продолжают одна другую; б) через электроны проводимости, которые попадают в места пересечения нескольких осей симметрии ряда окружающих ионов и могут вращаться поочередно вокруг любой из них (галенит); в) через электроны остовов одних атомов, которые могут использоваться в качестве внешних электронов ионов противоположного знака (пирит, марказит, халькопирит, пентландит). В этом случае электроны связи попадают на пересечение осей симметрии смежных ионов разного знака и могут вращаться вокруг каждой из пересекающихся осей. Возможны и комбинации этих видов связи между ионами. Наличие или отсутствие электронов проводимости может существенно влиять на строение кристаллов. Так, несмотря на аналогию химических формул сфалерита (ZnS) и галенита (PbS) и одинаковое число атомов в кубической ячейке, в первом из них ионы серы располагаются в тетраэдрических, а во втором — в октаэдрических пустотах решетки из ионов металла, в результате чего кристаллы будут относиться к различным группам симметрии.

6. Использование принципов симметрии электронных оболочек и знание углов конусов анизотропии ядер и электронов позволяет расчетным путем получить существенную дополнительную информацию о кристаллах, например определить соотношение параметров ромбической ячейки в марказите, и вычислить координаты центров атомов серы в пирите и марказите, что не удавалось сделать при помощи обычных представлений о сферически-симметричных атомах, а в ряде случаев понять причины явлений, известных из опытов.

7. Использование развитых в книге представлений дает возможность предсказать или разумно объяснить тип магнитной структуры (диамагнетизм, парамагнетизм, ферро- и антиферромагнетизм) кристаллов.

Ряд сведений о кристаллическом строении имеется в литературе [1—3].

Электронные оболочки в кристаллах галоидных соединений [4]

В нашей монографии [4] довольно подробно описано электронное строение галита NaCl и флюорита CaF_2. Здесь приведем только краткие сведения о строении ядер, входящих в эти соединения атомов. Ядро натрия состоит из 23 протонов и 12 метонов. Протонная фигура состоит из октаэдра с ребром из трех протонов, на четырех из восьми гранях которого упакованы еще 4 протона. Оси конусов анизотропии для них направлены параллельно трем четверным, четырем тройным и шести двойным осям симметрии ядра. Один из протонов размещается в центре ядра, и потому его момент не может быть скомпенсирован. Метонная фигура состоит из 12 метонов, расположенных по углам кубооктаэдра. Для нее характерно наличие четырех групп метонов, оси анизотропии которых направлены параллельно тройным осям симметрии ядра.

Симметрия электронного неонообразного остова атома натрия полностью самосогласуется с таким строением его ядра.

Ядро хлора состоит из 35 ядерных протонов и 18 метонов. Протонная фигура представляет собой тетраэдр с ребром из пяти протонов. Оси конусов анизотропии для этой фигуры направлены параллельно тройным и двойным осям симметрии ядра. Метонная фигура — октаэдр с ребром из трех

метонов без одного центрального метона. Для нее оси конусов анизотропии направлены параллельно четверным, тройным и двойным осям симметрии. Такая симметрия ядра соответствует симметрии замкнутой аргонообразной электронной оболочки, характерной для иона Cl^-.

Ядро кальция состоит из 40 ядерных протонов и 20 метонов. Протонная фигура представляет собой тетраэдр с ребром из шести протонов с усеченными углами. Для него характерно направление осей конусов анизотропии только параллельно четырем тройным осям симметрии ядра. Метонная фигура — тетраэдр с ребром из четырех метонов. Ей также свойственно направление осей конусов анизотропии параллельно тройным осям симметрии.

Симметрия этого ядра самосогласована с симметрией остова атома кальция или аргонообразного иона Ca^{2+}.

Наконец, ядро атома фтора — это октаэдр из 19 протонов, в котором каждое ребро состоит из трех протонов. Оси их конусов анизотропии направлены параллельно четверным и тройным осям симметрии октаэдра. Ось конуса анизотропии для центрального протона может быть направлена по любой из осей симметрии, но, вероятнее всего, по одной из тройных.

Метонная фигура представляет собой комбинацию октаэдра и тетраэдра, для которой характерно направление осей конусов анизотропии по двойным и тройным осям симметрии.

Такая симметрия ядра самосогласована с симметрией электронной оболочки иона F^-, которая совпадает с замкнутой торотетраэдрической неонообразной оболочкой.

Электронные оболочки в кристаллах окислов

Рассмотрим прежде всего кристаллы льда.

Ядро атома кислорода состоит из 16 ядерных протонов и 8 метонов. Наиболее симметричная протонная упаковка будет иметь вид усеченного тетраэдра (лавесовского полиэдра) с шестиугольными центрированными и треугольными гранями. Для такой фигуры направления осей конусов анизотропии протонов будут параллельны тройным осям симметрии ядра. Метонная оболочка представляет собой два упакованных один на другом тетраэдра. Для нее все оси конусов анизотропии будут параллельны тройным осям симметрии ядра. Наряду с таким ядром кубической сингонии возможно существование и тригонального ядра кислорода.

Ядро водорода состоит из одного протона, направление оси конуса анизотропии его в свободном атоме может быть произвольным.

Молекула воды H_2O будет выглядеть следующим образом. Атом кислорода, присоединяя к шести электронам своей внешней оболочки еще два электрона от двух атомов водорода, превращается в анион O^{2-} с замкнутой восьмиэлектронной торотетраэдрической оболочкой типа неона. Равновероятны молекулы воды как с правым, так и с левым вращением электронов в тороидах. Четыре орбитальных момента электронов в тороидах, расположенных под тетраэдрическими углами один к другому, в сумме дадут нулевой момент. Симметрия такой оболочки будет полностью согласована с симметрией ядра кислорода. Спины электронов в каждом тороиде будут антипараллельны — у половины всех электронов (4) они будут направлены к ядру, а у другой половины — от него. Геометрическая сумма спиновых моментов также получается равной нулю.

Два ядра атомов водорода размещаются против центров двух тороидов. Оси их конусов анизотропии будут совпадать с двумя осями конусов анизотропии ядра кислорода. При этом средняя траектория электронов в тороидах будет близкой к кольцевой линии пересечения конусов анизотропии ядер кислорода и водорода. Вероятнее всего, электроны в тороидах будут вращаться несколько дальше от тройной оси симметрии таким образом, чтобы конусы анизотропии этих электронов проходили через ядро кислорода. Два других тороида из неподеленных электронов останутся пустыми. Поэтому центр тяжести положительных зарядов молекулы сместится из центра электронной оболочки иона кислорода в сторону двух водородных протонов, что приведет к появлению дипольного момента (молекула станет полярной) и несколько исказит величину валентного угла (от 109° до 105°). Спин каждого из ядер водорода может быть направлен как к ядру кислорода, так и от него. Для переориентировки моментов этих ядер большой энергии не потребуется.

При сближении двух молекул воды протоны одной молекулы будут располагаться против центров вакантных тороидов соседней молекулы, образуя водородные связи, менее прочные, чем химические, и более прочные, чем вандерваальсовы. В таких связях протон находится между двух тороидов, ближе к одному из ядер кислорода. Общая длина такой связи будет определяться в основном электростатическими взаимодействиями протонов и электронов. Магнитные взаимодействия только немного изменят длину этих связей и определят взаимную ориентировку смежных молекул воды.

Если сблизятся левая и правая молекулы, то магнитные силовые линии, выходящие из тороидов одной молекулы, будут входить в центры тороидов соседней молекулы, образуя общее замкнутое магнитное поле. Электроны в стыкующихся тороидах будут вращаться в одну и ту же сторону, т. е. притягиваться. Такое поле несколько укоротит водородную связь. Электронные оболочки ионов смежных атомов кислорода сориентируются зеркально-симметрично относительно плоскости, перпендикулярной к водородной связи (рис. 1, *а*). Только при этом длина магнитных силовых линий будет минимальной.

При сближении двух левых или двух правых молекул воды магнитные силовые линии, выходящие из центров тороидов одной молекулы, будут входить в места стыков тороидов второй молекулы, и наоборот. При этом электроны двух тороидов на стыке двух молекул будут вращаться вокруг водородной связи в разные стороны. Их орбитальные моменты окажутся направленными навстречу один другому, что приведет к магнитному отталкиванию и к удлинению водородной связи. В этом случае кратчайшая длина магнитных силовых линий получится при центрально-симметричном расположении тороидов в двух смежных молекулах (рис. 1, *б*). Опытные данные показывают, что действительно при зеркальной симметрии электронных оболочек смежных молекул воды длина водородной связи несколько короче, чем при наличии центра инверсии [5].

Необходимо отметить, что зеркальная и центральная симметрии относятся только к электронным оболочкам смежных ионов кислорода. Протон, образующий водородную связь, будет находиться только по одну сторону от плоскости симметрии или центра инверсии. Ядра водорода одной молекулы расположатся в одной плоскости, а ядра второй — в перпендикулярной к ней плоскости.

При увеличении числа последовательно соединенных молекул воды до шести возникнут гофрированные кольца. Если кольцо образуется только из

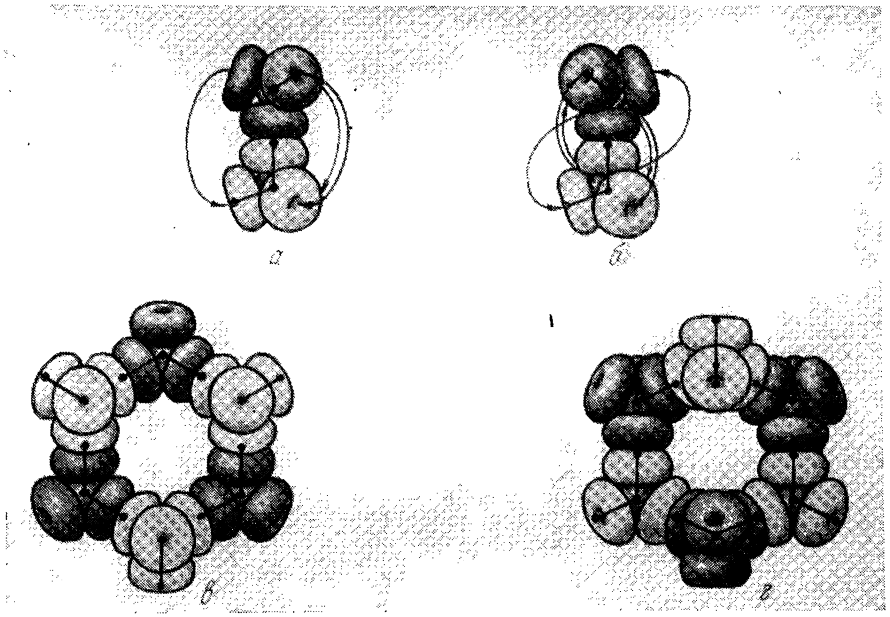


Рис. 1. Водородные связи между молекулами воды

Расположение электронных оболочек:
а — зеркально-симметричное; *б* — центрально-симметричное; *в* — шестиугольное молекулярное кольцо типа «кресло»; *г* — шестиугольное кольцо типа «ванна»

левых или только из правых молекул, то оно принимает конфигурацию типа «кресло» (рис. 1, *в*). Если же объединяются три левые и три правые молекулы воды, то кольцо получается типа «ванна» (рис. 1, *г*).

При сближении нескольких колец типа «кресло» возникает гофрированный слой. Молекулы воды в нем размещаются на двух уровнях. Половина из них повернута кверху стыками трех тороидов, остальные — отдельными тороидами. На стыках каждых трех колец возникают новые. Всего получается три типа колец, различающихся расположением водородных связей. В кольцах первого типа три пары водородных связей наклонены по периметру кольца навстречу одна другой, а три другие пары расположены в трех радиальных плоскостях симметрии, причем одна из них направлена вертикально, а другая наклонена наружу. В кольцах второго типа все водородные связи по периметру кольца направлены по часовой стрелке: три связи — по вертикали и три — по радиусам кольца с наклоном наружу. В кольцах третьего типа расположение связей такое же, как и в кольцах второго, только направлены они против часовой стрелки (рис. 2, *а*). В отличие от колец первого типа в кольцах второго и третьего типов нет радиальных плоскостей симметрии. При этом получается, что смежные слои будут зеркально-симметричными. Это приведет к образованию вертикально расположенных колец типа «ванна». Так возникнет кристаллическая решетка обычного гексагонального льда с так называемой тридимитной структурой (рис. 2, *б*). Лед относится к числу молекулярных кристаллов с водородными связями.

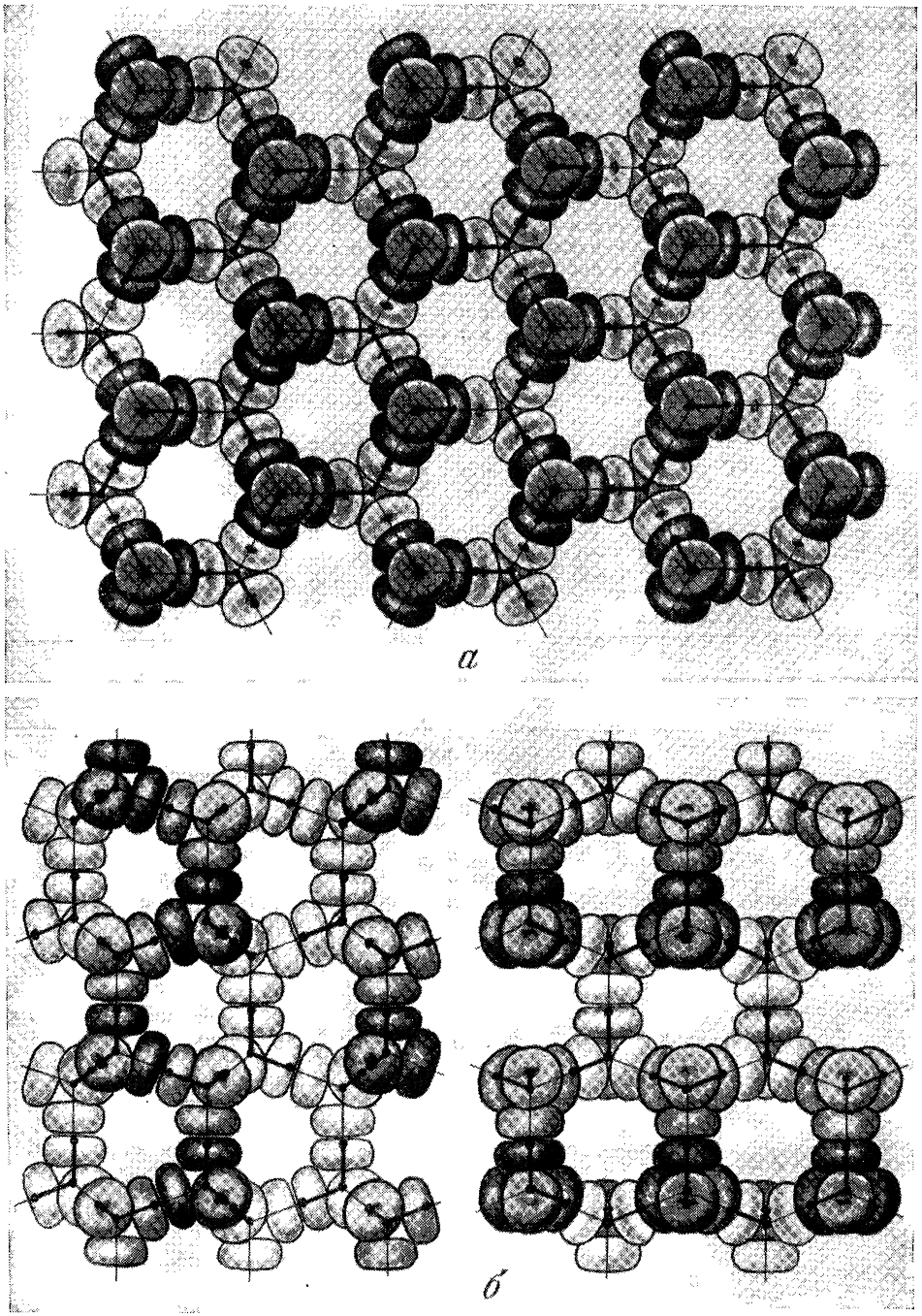


Рис. 2. Схема электронного строения гексагонального льда
а — план; *б* — вертикальный разрез и профильная проекция

Изучая энтропию льда, исследователи пришли к выводу, что все направления водородных связей равновероятны, и потому решили, что все направления водородных связей во льду должны быть неупорядоченными и что равновероятность достигается только за счет статистики.

Мы придерживаемся противоположной точки зрения и считаем, что при симметричном расположении водородных связей можно достигнуть равной вероятности. В самом деле, приведенная схема водородных связей является упорядоченной и симметричной, однако она охватывает только 50% всех возможных направлений водородных связей. Так, все вертикальные связи на рис. 2, *а* и *б* направлены только кверху. Однако нужно учесть следующее: потенциальный барьер в плоскости между двумя тороидами смежных молекул получается небольшим и при наличии теплового движения молекул он может быть преодолен. Тогда протон от одной молекулы перейдет к смежной, что будет равносильно изменению направления водородной связи на прямо противоположное. По-видимому, протоны будут колебаться между двумя связанными водородной связью молекулами, проводя 50% времени возле одной из них, а остальное время — возле другой. Тогда все направления связей в кристалле льда также окажутся равновероятными статистически и условия, полученные из анализа энтропии льда, будут удовлетворены. Кроме того, отпадет указанное ограничение симметрии водородной связи, она окажется статистически-симметричной.

Подобная структура льда является далеко не единственной. Так, если смежные гексагональные слои будут образованы только из правых или только из левых молекул, то в местах стыковки слоев возникнут не плоскости симметрии, а центры инверсии. Это приведет к повороту смежных слоев на 60°. В результате возникнет трехслойный кубический лед (по упаковке ионов кислорода), в котором против центров колец одного слоя расположатся стыки колец соседних слоев. В таком льду все кольца, как горизональные, так и наклонные, получатся только типа «кресло». Так как обычно число правых и левых молекул воды одинаковое, вероятность самопроизвольного образования кубического льда из молекул одного только правого или левого типа мала. Чтобы такой лед получался сам собой, необходимо найти способ предварительной сортировки молекул на правые и левые (не исключено, что этого удастся добиться, например, биологическим путем).

При низких температурах и очень высоких давлениях смежные гексагональные слои молекул могут сдвинуться таким образом, что вертикальные водородные связи правого слоя расположатся в центрах колец левого слоя, и наоборот. Это приведет к возникновению двух кубических взаимно проникающих пространственных подрешеток (одной — из четных, а другой из нечетных слоев). Одна решетка будет состоять только из левых, а другая только из правых молекул. Поэтому для получения такой структуры не потребуется предварительной сортировки молекул. Водородные связи будут существовать только внутри каждой из таких подрешеток. Между разными подрешетками они будут отсутствовать. Электронные оболочки ионов кислорода обеих подрешеток окажутся сильно сближенными, что вызовет между ними значительные внутренние силы отталкивания. В результате водородные связи каждой из подрешеток сильно ослабнут и несколько удлинятся. Кубический лед станет почти вдвое тяжелее обычного, внутри которого имеются большие полости, и поэтому сможет тонуть в воде. Температура его плавления окажется существенно выше, чем у обычного гексагонального льда [4]. В монографии Н. Х. Флетчера [6] был описан подобный лед, полученный

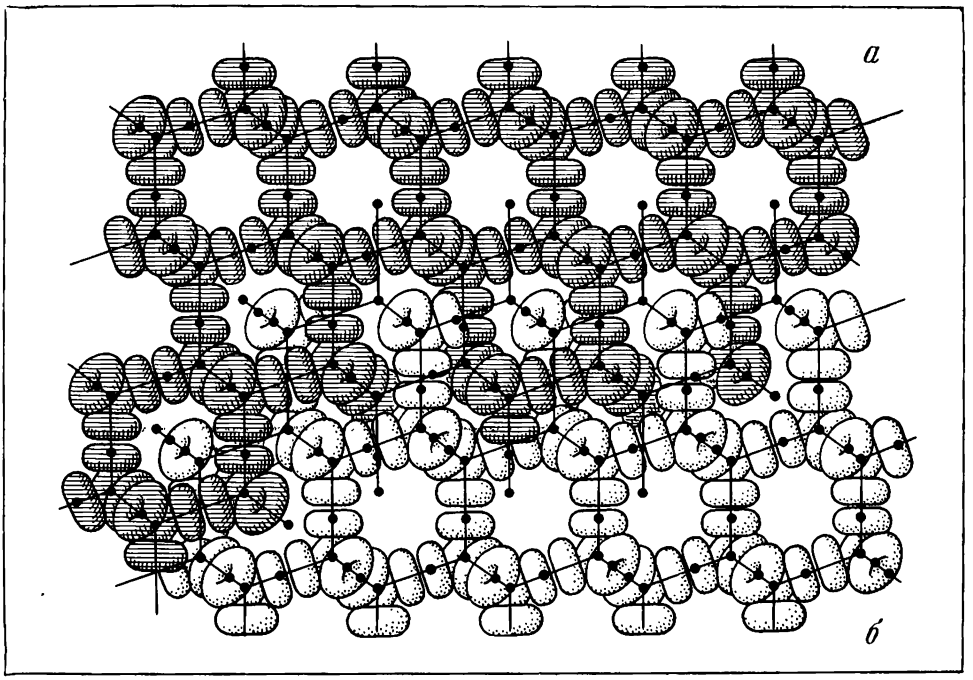


Рис. 3. Схема электронного строения сдвоенного кубического льда

опытным путем. Свойства его оказались такими, как и предполагалось нами ранее [4].

На рис. 3 приведено электронное строение такого льда. В верхней части рисунка показана одна из подрешеток (*а*), а в нижней — другая (*б*). Посередине изображено их взаимное проникновение.

В настоящее время искусственным путем получены девять различных полиморфных модификаций льда (гексагональная, кубические, ромбоэдрическая, тетрагональные и моноклинная).

Литература о строении и свойствах различных льдов весьма обширна: интересные материалы по этому вопросу можно найти в работах [6, 7, 8].

Рассмотрим теперь одну из полиморфных модификаций корунда α-Al_2O_3.

Ядро алюминия состоит из 27 ядерных протонов и 14 метонов. Протонная фигура представляет собой октаэдр с ребром из 3 протонов, в который входят 19 протонов и еще 8 протонов, упакованных против центров граней этого октаэдра. Направления осей конусов анизотропии такой фигуры параллельны четверным и тройным осям симметрии ядра. Ось конуса анизотропии центрального протона может быть направлена по любой из осей, но вероятнее всего — по одной из тройных осей симметрии. Метонная фигура — это гранецентрированный куб, для которого направления осей конусов анизотропии будут параллельными четверным и тройным осям симметрии ядра.

Наряду с описанным ядром кислорода кубической сингонии, может существовать еще ядро тригональное. Оно также содержит 16 ядерных протонов и 8 метонов, но расположенных иначе. Протонная фигура будет комби-

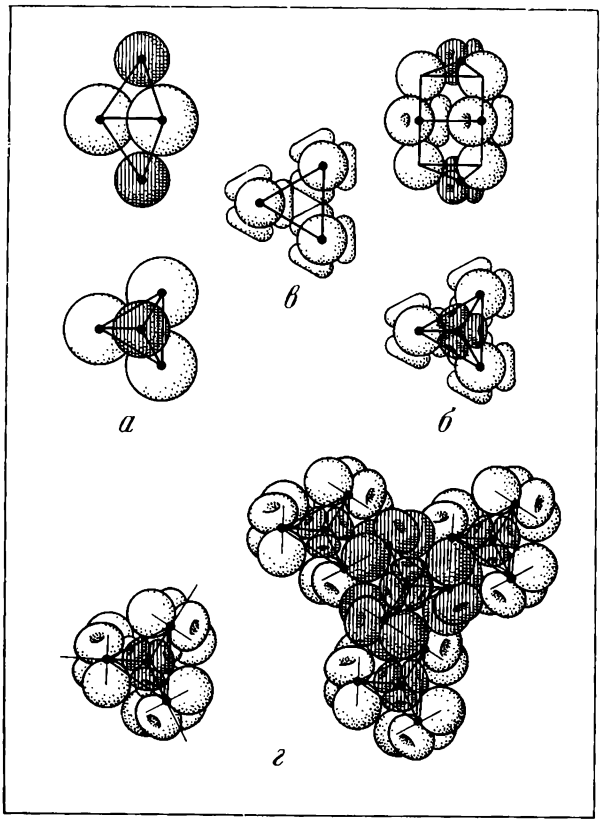


Рис. 4. Схема строения α-корунда

а — молекула Al_2O_3 из шарообразных ионов; *б* — схема электронного строения одиночной молекулы Al_2O_3; *в* — электронные оболочки кислорода в молекуле Al_2O_3; *г* — стыковка молекул в слое

нацией из тригональной призмы и тригональной дипирамиды (призма со срезанными углами). Протоны расположатся в три слоя. Средний слой из четырех протонов будет представлять собой центрированный треугольник из четырех протонов, а два крайних — правильные шестиугольники. Оси конусов анизотропии 12 протонов в этих слоях будут направлены параллельно одна другой и тройной оси симметрии всего ядра. Так же будет направлена и ось конуса анизотропии центрального протона среднего слоя. Оси остальных трех протонов среднего слоя будут лежать в этой плоскости под углом 120° одна к другой. Метонная фигура — это базоцентрированная тригональная призма. Метоны в ней расположатся в два слоя в виде центрированных треугольников. Все их оси конусов анизотропии будут параллельны одна другой и тройной оси симметрии ядра.

Электронная оболочка атома алюминия состоит из неонообразного торотетраэдрического остова, упакованного на внутренней сферической гелийобразной оболочке. Симметрия этого остова полностью самосогласуется с симметрией ядра алюминия. Поверх такого остова, против стыков его тороидов размещаются три внешних электрона под тетраэдрическими углами один к

другому. Их потенциалы ионизации составляют 5,984; 18,883; 28,44 *эв*. При кристаллизации два атома алюминия теряют 6 внешних электронов, которые переходят к трем атомам кислорода, замыкая их оболочки до восьмиэлектронных неонообразных. В соответствии с тригональной симметрией ядра кислорода строение электронной оболочки примет вид трех тороидов, оси симметрии которых будут расположены в одной плоскости под углом 120° одна к другой, а два неспаренных электрона замкнут эту оболочку сверху и снизу по тройной оси симметрии молекулы.

Наиболее вероятная симметрия молекулы Al_2O_3 — тригональная дипирамида. В средней ее части расположатся по углам равностороннего треугольника три иона кислорода O^{2-}, а сверху и снизу против центра треугольника — два иона Al^{3+} (рис. 4, *а*).

В одиночной молекуле Al_2O_3 тройные оси симметрии ионов кислорода будут параллельны одна другой и тройной оси симметрии молекулы. Их двойные оси симметрии расположатся в средней плоскости молекулы, причем одна из них для каждого иона кислорода пройдет через центр молекулы. Ионы кислорода будут повернуты к этому центру одним из своих тороидов. Тогда сверху и снизу ионов кислорода образуется равносторонний треугольник из трех неспаренных электронов (рис. 4, *б*). Торотетраэдрический остов иона алюминия упакуется против центра этого треугольника вдоль тройной оси симметрии молекулы таким образом, что каждый из неспаренных электронов кислорода попадет на стык трех тороидов иона Al^{3+}. Каждый из этих ионов расположится одним из своих тороидов к центру молекулы (рис. 4, *б*). Они будут зеркально-симметричными и обращены наружу стыками трех тороидов своего остова. Неспаренные электроны при этом попадут на пересечения вертикальных тройных осей симметрии ионов кислорода и наклонных тройных осей симметрии ионов алюминия.

Особенностью такой молекулы будет то, что при сближении ионов алюминия одного с другим вдоль тройной оси симметрии молекулы ионы кислорода повернутся вокруг своих осей симметрии, проходящих через центр молекулы, и соответственно ионы алюминия вынуждены будут поворачиваться вокруг тройной оси симметрии молекулы в разные стороны. Углы такого закручивания ионов будут зависеть от условий стыковки каждой молекулы Al_2O_3 с соседними. Молекула будет напоминать трехзаходный винт с поворотными лопастями.

На рис. 4, *г* изображен один слой молекул Al_2O_3. С учетом разворота ионов кислорода и алюминия получается, что лежащие сверху неспаренные электроны образуют гексагональную сетку из шестиугольников, окруженных треугольниками. При этом ионы кислорода образуют тригональную сетку, состоящую из трех ионов каждой молекулы, разделенных небольшими промежутками. Разворот ионов Al^{3+} в плане будет на 30° сверху и снизу в разные стороны. Аналогичная молекула из лежащего выше слоя должна будет расположиться над центром треугольника из рассматриваемых молекул таким образом, чтобы неспаренные электроны нижнего слоя ионов кислорода пришлись против центров тороидов ее нижнего остова алюминия. Это приведет к тому, что все молекулы верхнего слоя целиком вынуждены будут повернуться вокруг вертикальных тройных осей симметрии на 60° (или на 180°) относительно молекул смежного слоя.

Шесть неспаренных электронов одной молекулы образуют октаэдр, на серединах трех ребер которого будут находиться центры ионов кислорода. Каждый ион алюминия окажется в центре куба без двух углов, расположен-

ных на тройной оси симметрии молекулы. При этом три электрона, принадлежащих данной молекуле, расположатся против стыков тороидов иона алюминия, а три неспаренных электрона от трех ионов кислорода (разных молекул) смежного слоя разместятся против центров тороидов иона алюминия.

Продолжая аналогичное построение, найдем, что повторение упаковки возникнет через шесть слоев молекул. Получающаяся решетка будет ромбоэдрической (тригональной), вид симметрии окажется дитригонально-скаленоэдрическим и группа симметрии — $R\bar{3}c$ (D_{3d}^6).

Ввиду того, что каждый неспаренный электрон иона кислорода будет одновременно принадлежать и иону алюминия данной молекулы, и иону алюминия смежной молекулы, причем расстояния до обеих молекул получатся одинаковыми, эту связь нельзя считать молекулярной, она превратится в химическую. Неспаренные электроны свяжут смежные с ними ионы кислорода и алюминия в единый прочный каркас. Электронов проводимости в кристалле корунда не будет. Поэтому он получится неэлектропроводным и прозрачным.

Опыт показывает, что действительно α-корунд является ромбоэдрическим (тригональным) кристаллом, относится к дитригонально-скаленоэдрическому виду симметрии и к группе симметрии $R\bar{3}c$ (D_{3d}^6). Ионы кислорода в нем образуют слои несколько искаженной плотнейшей гексагональной упаковки с разной ориентацией треугольников в смежных слоях, ионы алюминия располагаются по углам шестиугольных колец по корундовому закону, упаковка повторяется через 6 слоев, кристалл является весьма твердым, прозрачным и неэлектропроводным.

Ряд полезных данных о свойствах и строении корунда можно найти в работе [9—11].

Поскольку строение электронных оболочек кварца, тридимита и кристобаллита, каждого в α- и β-модификациях, а также анализ различных двойников кварца довольно подробно изложены в книге [4], в данной монографии останавливаться на них мы не будем.

Электронные оболочки в кристаллах кислородных солей

Рассмотрим прежде всего электронное строение кристаллов кальцита $CaCO_3$.

Как известно из предыдущего, в ядре атома кальция оси конусов анизотропии протонов и метонов направлены параллельно четырем тройным осям симметрии ядра.

Выше было рассмотрено также строение ядра углерода, в частности тригональная его модификация. В этом ядре оси конусов анизотропии для протонов направлены параллельно тройной оси симметрии ядра и трем двойным осям симметрии, идущим в одной плоскости под углом 120° одна к другой. Для метонов все оси конусов анизотропии идут параллельно тройной оси симметрии ядра.

В ядре кислорода оси конусов анизотропии протонов направлены параллельно тройной оси симметрии ядра, а также вдоль трех двойных осей симметрии под углом 120° одна к другой, т. е. и здесь оси конусов анизотропии параллельны тройной оси симметрии этого ядра.

Также были рассмотрены формы электронных оболочек и их строение для ионов Ca^{2+}, C^{4+} и O^{2-}. Ион кальция получился дважды тетраэдрическим — аргонообразной формы. Ион углерода C^{4+} оказался сферически-симметрич-

ным гелийобразным, а ион тригонального кислорода — неонообразным, состоящим из трех тороидов, оси которых лежали в одной плоскости под углом 120° одна к другой. Неспаренные электроны располагались по тройной оси симметрии иона выше и ниже плоскости двойных осей симметрии.

Симметрия этих остовов является самосогласованной с симметрией ядер соответствующих атомов.

Рассматривая баланс электронов всех входящих в молекулу атомов, найдем, что два внешних электрона атома кальция и четыре электрона атома углерода будут оторваны от них и перейдут к трем атомам кислорода, замкнув их электронные оболочки до неонообразных, т. е. действительно строение такой молекулы будет отвечать химической формуле $CaCO_3$.

Сферически-симметричный ион углерода C^{4+} окружит себя тремя ионами кислорода O^{2-}, образуя комплексный анион $(CO_3)^{2-}$. В свободном состоянии этого аниона три иона кислорода O^{2-} расположатся по углам равностороннего треугольника, каждый одним из своих тороидов к центру аниона. В той же плоскости окажутся и все их двойные оси симметрии. Одна из таких осей от каждого иона O^{2-} будет направлена к центру аниона $(CO_3)^{2-}$, где разместится симметричный ион C^{4+}. Это будет согласовываться с тригональной симметрией такого ядра углерода. Тройные оси симметрии ионов кислорода будут направлены перпендикулярно к плоскости комплексного аниона и параллельно его тройной оси симметрии, проходящей через центр (рис. 1, *а*). При этом неспаренные электроны этого аниона расположатся по углам тригональной призмы.

Этот анион, аналогично молекуле Al_2O_3, будет способен к повороту всех трех ионов O^{2-} вокруг двойных осей симметрии аниона, проходящих через его центр, на угол, отвечающий условиям стыковки с ионами Ca^{2+}. Форма такого аниона будет напоминать трехзаходный винт с поворотными лопастями (рис. 1, *б*). В этом случае неспаренные электроны в каждом анионе вместо тригональной призмы образуют вокруг его центра октаэдр.

Располагая такие анионы в одной плоскости, получим из этих неспаренных электронов гексагональный слой, состоящий из шестиугольников, окруженных треугольниками. При этом ионы кислорода образуют тригональную упаковку, где они будут расположены тройками, разделенными некоторыми промежутками (искажающими плотнейшую гексагональную упаковку).

Дважды тетраэдрические ионы кальция Ca^{2+} расположатся сверху этого слоя над центрами пустых треугольников из неспаренных электронов от трех смежных анионов. Этот дитетраэдр будет обращен своей вершиной книзу таким образом, чтобы неспаренные электроны ионов кислорода попали в мало экранированные места в серединах трех его ребер, идущих от нижней вершины тетраэдра звездообразно и наклонно вверх. Таким образом, неспаренные электроны окажутся на пересечении тройных осей симметрии ионов кислорода O^{2-} и двойных осей симметрии ионов кальция Ca^{2+}. При этом они химически свяжут комплексные анионы $(CO_3)^{2-}$ с ионами кальция Ca^{2+} в единый каркас. Таким образом, электронов проводимости в кристалле кальцита не будет, он получится неэлектропроводным и прозрачным.

Прочность каркаса для кальцита будет существенно меньше, чем для корунда. В самом деле, три иона кислорода в молекуле корунда связываются между собой двумя ионами Al^{3+} в жесткую пространственную конструкцию шестью валентными связями, а три кислорода в комплексном анионе кальцита — только одним ионом углерода C^{4+}, т. е. четырьмя валентными связями. Каждый неспаренный электрон в корунде будет связан с кислородом

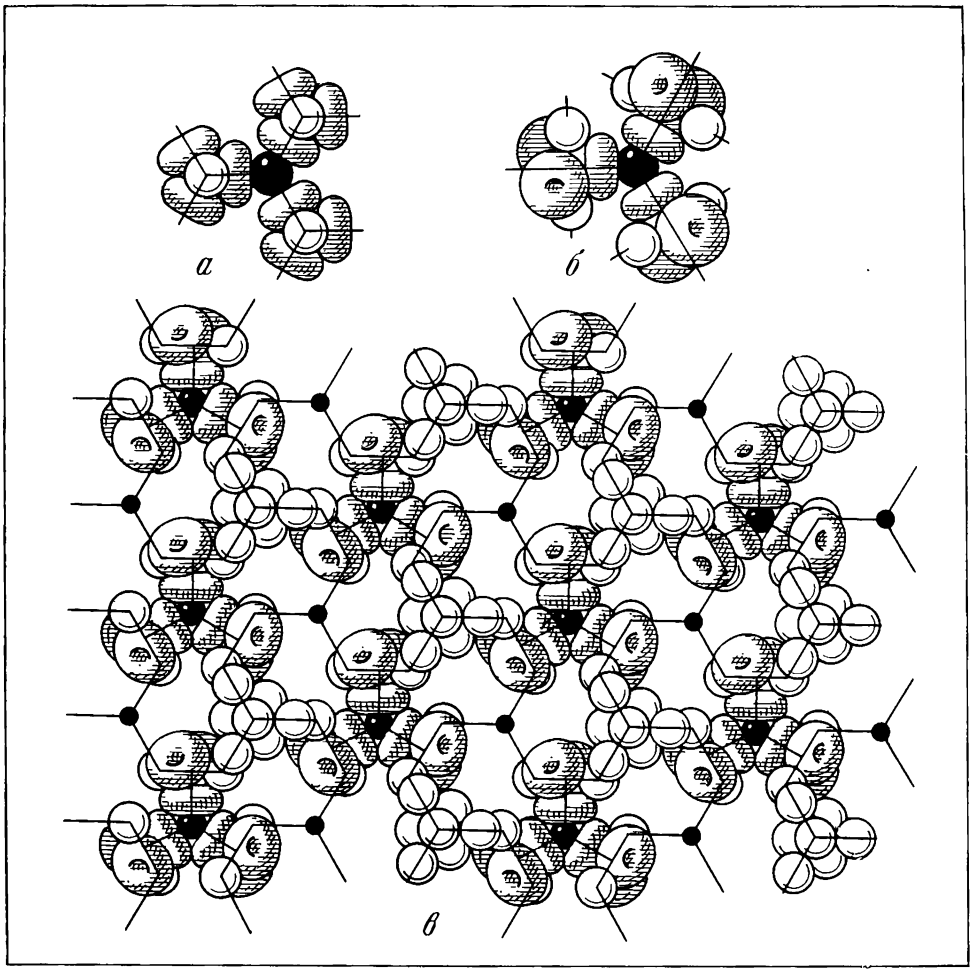


Рис. 1. Электронное строение кальцита

а — комплексный анион $(CO_3)^{2-}$; *б* — комплексный анион с развернутыми ионами кислорода; *в* — электронное строение слоя ионов Ca^{2+} и $(CO_3)^{2-}$

и двумя ионами Al^{3+}, а в кальците — с одним ионом кислорода и только одним ионом Ca^{2+}.

Продолжая построение кристалла кальцита (рис. 1, *в*), заметим, что если нижние ребра на дважды тэтраэдрическом ионе Ca^{2+} располагаются звездой, то верхние ребра образуют треугольник, параллельный плоскости рисунка. Поэтому при упаковке анионов $(CO_3)^{2-}$ они вынуждены будут повернуться на 180° относительно анионов нижнего слоя. Это вызовет поворот на такой же угол следующего слоя ионов Ca^{2+}. Полное повторение упаковки получится только через шесть слоев. При этом возникнет кристалл ромбоэдрической (тригональной) сингонии, дитригонально-скаленоэдрического вида симметрии. Группа симметрии будет та же, что и у корунда, т. е. $R\bar{3}c$ (D^6_{3d}).

Сопоставляя сказанное с опытом, заметим, что кальцит действительно кристаллизуется в ромбоэдрической сингонии, дитригонально-скаленоэдрическом виде симметрии и группе симметрии $R\bar{3}c$ (D^6_{3d}). Кристалл состоит из шести слоев плоских треугольных комплексных анионов $(CO_3)^{2-}$ в виде несколько разреженной плотнейшей гексагональной упаковки, в смежных слоях эти анионы ориентированы в разных направлениях. Кристалл кальцита значительно мягче, чем корунд (твердость, по Моосу, 3 вместо 9), прозрачен и неэлектропроводен.

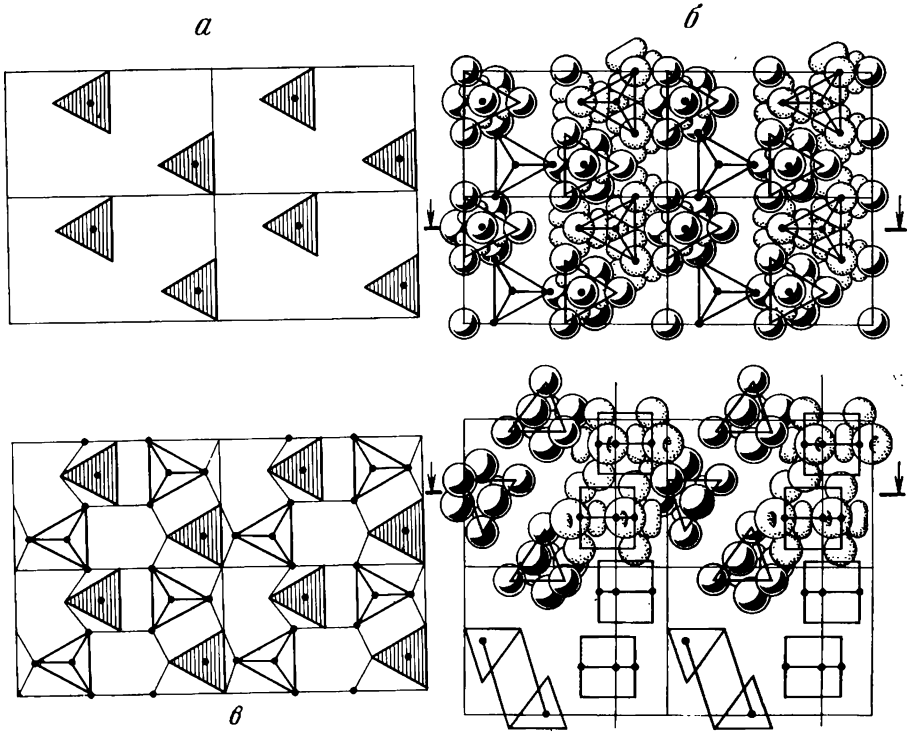


Рис. 2. Электронное строение арагонита

а — упаковка ионов Ca^{2+}; *б* — упаковка комплексных анионов $(CO_3)^{2-}$ в арагоните; *в* — второй слой ионов в арагоните

Описанный кристалл кальцита возникает, если все комплексные анионы $(CO_3)^{2-}$ будут только одного сорта — все с одним и тем же направлением вращения электронов в тороидах, либо все правые, либо все левые. Если же правые и левые анионы будут встречаться в равных количествах, то вместо кальцита получится арагонит.

В самом деле, электронное строение арагонита можно представить следующим образом. Из тетраэдрических ионов кальция Ca^{2+}, ориентированных одинаковым образом — вершинами книзу, образуется тригональный слой, в котором верхние электроны образуют гексагональные кольца, окруженные треугольниками (рис. 2, *а*). Комплексные анионы $(CO_3)^{2-}$ расположатся над центрами получившихся шестиугольников. При этом винтовой

закрутки ионов кислорода (как в кальците) не произойдет, т. е. неспаренные электроны ионов кислорода расположатся вокруг аниона по углам тригональной призмы, аналогично рис. 1, *б*, а не октаэдра, как в кальците.

Правые и левые анионы будут повернуты один относительно другого на 180° в плане. Тогда неспаренные электроны для анионов одного сорта придутся против слабо экранированных середин ребер ионов кальция, а для другого сорта — в промежутках между ионами кальция. Первые окажутся при этом расположенными выше, чем вторые (рис. 2, *б*). В результате такой слой потеряет тригональную симметрию и станет ромбическим. Соотношение размеров перпендикулярных ребер ячейки в плане станет равным не $\sqrt{3} = 1{,}73$, а несколько меньше (из опыта оно получается равным 1,60).

Продолжив построение, получим, что следующий такой же слой повернется на 180° в плане (рис. 2, *в*). Комплексные анионы одного и того же сорта окажутся один над другим, также повернутыми на 180°.

Продольный разрез получившегося кристалла показан на рис. 2, *г*. Он будет относиться к ромбической сингонии, ромбо-дипирамидальному виду симметрии и группе симметрии $Pmcn$ (D_{2h}^{16}). Из-за отсутствия электронов проводимости кристалл арагонита будет неэлектропроводным и прозрачным.

Экспериментальные данные полностью подтверждают такое строение и свойства арагонита.

Так как в неорганической природе количество правых и левых атомов и молекул одинаково, а в органической — преобладает только одна из модификаций, можно высказать правдоподобное предположение о том, что кальцит имеет органическое, а арагонит — неорганическое происхождение.

Некоторые данные о строении и свойствах кальцита и арагонита можно найти в [1—3; 9—11].

Рассмотрим еще электронное строение шеелита $CaWO_4$.

Остов атома вольфрама W^{6+} представляет собой два упакованных один на другом электронных тетраэдра. Он имеет в серединах своих ребер места минимальной экранировки, где и размещаются шесть внешних неспаренных электронов вольфрама, расположенных по углам октаэдра.

При высоких температурах все шесть внешних электронов вольфрама могут быть удалены, после чего останется дважды тетраэдрический его остов W^{6+}. Атом кальция легко потеряет свои два внешних электрона. Оставшийся ион Ca^{2+} получится также в виде двух упакованных один на другом тетраэдров, т. е. будет иметь ту же форму, что и ион вольфрама, но несколько иные размеры. Шесть электронов вольфрама и два от кальция достаточно для заполнения электронных оболочек четырех атомов кислорода до восьмиэлектронных неонообразных торотетраэдрических. Поэтому химическая формула шеелита действительно получится $CaWO_4$. Электронов проводимости в кристалле не будет, и потому он не должен проводить электрический ток.

Дважды тетраэдрические остовы вольфрама и кальция будут стремиться окружить себя четырьмя ионами кислорода O^{2-}.

Для определения электронного строения кристалла шеелита выполним из крупных ионов кислорода плотнейшую кубическую упаковку. Затем поочередно заполним в ней тетраэдрические пустоты ионами вольфрама и кальция. Но тогда для соблюдения количественного соотношения между числом ионов вольфрама и кальция и числом ионов кислорода каждый из катионов должен быть окружен не четырьмя, а восемью ионами кислорода. Это может быть получено только при использовании двух взаимно проникающих плот-

нейших упаковок из ионов кислорода. Так как тетраэдрические пустоты в этих решетках уже заняты, то друг относительно друга две такие подрешетки должны будут находиться в октаэдрических пустотах. В результате упаковка ионов кислорода превратится в примитивную решетку с половинным параметром ячейки. Расположив в такой решетке ионы вольфрама и кальция наиболее симметрично, получим в результате тетрагональную ячейку из двух установленных один на другом кубов. В первом приближении высота такой ячейки должна быть в 2 раза больше ребра ее основания. Ионы вольфрама и кальция расположатся в ней аналогично ионам меди и железа в тетрагональном халькопирите.

Для уточнения этой предварительной схемы электронного строения шеелита необходимо учесть, что форма остовов вольфрама и кальция дитетраэдрическая. Это значит, что четыре электрона остова расположены дальше от ядра, чем четыре других. Поэтому и четыре иона кислорода должны быть ближе, а четыре других — дальше от каждого остова вольфрама или кальция. Это приведет к искажению кубической упаковки ионов кислорода и деформации тетрагональной ячейки вдоль четверной (двойной) оси симметрии.

Вид такой ячейки шеелита изображен на рис. 3 в двух проекциях. На этом рисунке видно небольшое смещение ионов кислорода. Полученное по построению отношение ширины ячейки к ее высоте близко к эмпирическому отношению 0,462 или обратному ему 2,17.

Если в такой ячейке построить протонные конусы анизотропии с вертикальными осями, то они пересекутся весьма близко от центров атомов вольфрама и кальция на гранях ячейки. Возникающие при этом силы отталкивания будут стремиться растянуть ячейку по вертикали. Кроме того, следует еще провести из центров атомов метонные конусы анизотропии, оси которых идут по двойным осям симметрии ядра (на рисунке под углом 45° к вертикали). Тогда окажется, что эти конусы анизотропии пройдут почти точно по диагопали грани ячейки. Возникающие при этом силы притяжения будут стремиться сжать ячейку по вертикали. Очевидно, что действительное положение будет отвечать некоторому среднему из этих двух случаев, когда силы притяжения и отталкивания уравновесятся. Вычислив теоретические отношения размеров ячейки, получим для протонных конусов отношение высоты ячейки к ее ширине, равное $3/\sqrt{2} = 2{,}12$, а для метонных конусов $7 + 2\sqrt{2}/7 - 2\sqrt{2} = 2{,}30$ (в среднем 2,21) при эмпирическом значении этого отношения 2,17, что дает ошибку расчета менее 2%. Получить такую точность расчета на основании существующей теории упаковок из шарообразных атомов не представляется возможным.

Сопоставив эти соображения и расчеты с результатами опытов, найдем, что кристаллы шеелита действительно обладают тетрагональной ячейкой, параметры которой весьма близки к теоретическим, расположение ионов вольфрама и кальция получается таким же, как в обычном халькопирите, остовы вольфрама и кальция находятся в тетраэдрических пустотах между ионами кислорода, кристалл шеелита неэлектропроводен.

Ряд полезных данных о свойствах и строении кислородных солей и подробная библиография по этому вопросу имеются в работах [9—13].

Обобщая все изложенное о строении электронных оболочек в кристаллах кислородных солей, необходимо отметить следующее.

1. Рассмотренные примеры кристаллов кислородных солей относятся к трехкомпонентным соединениям элементов. Здесь даны примеры только для

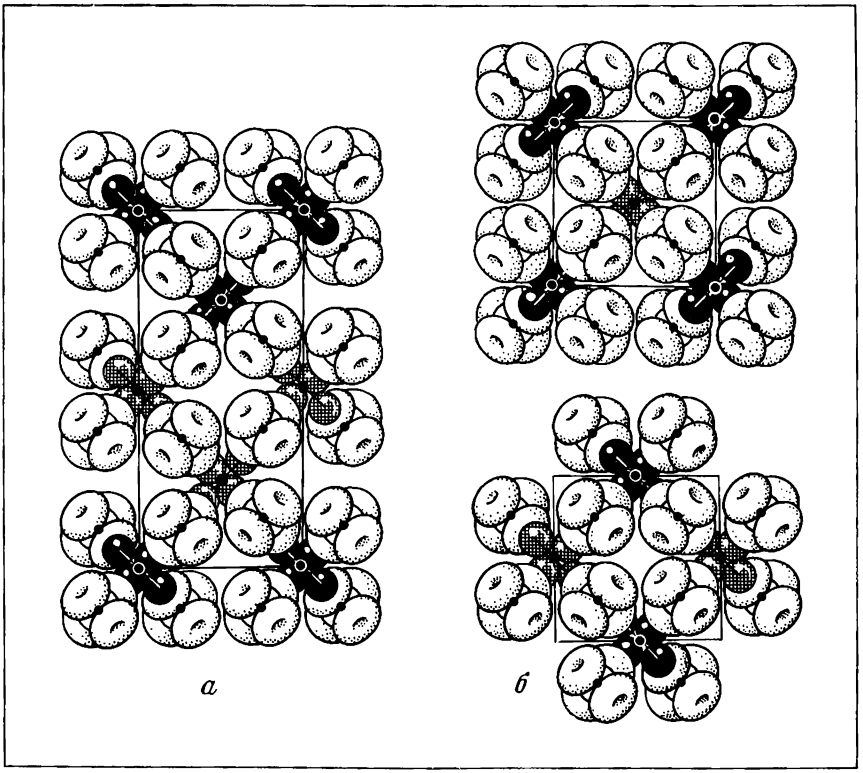


Рис. 3. Электронное строение шеелита $CaWO_4$
а — вид спереди; *б* — план

некоторых карбонатов и вольфраматов, однако в нашем распоряжении имеются данные об электронном строении и других кислородных солей, а также минералов и сплавов.

2. Анализ электронного строения начинался с разбора симметрии ядер элементов, входящих в изучаемое соединение. Затем рассматривалось строение и симметрия электронных остовов атомов, которая во всех случаях оказалась самосогласованной с симметрией ядер этих атомов. Дальше изучалось электронное строение и симметрия комплексных анионов с учетом симметрии и формы гибридизированных электронных оболочек. Затем производилась стыковка катионов и комплексных анионов, проверялся баланс электронов, устанавливалось наличие электронов проводимости и изменение симметрии электронных оболочек одиночных атомов при объединении их в кристалл. Теоретически находилась сингония, вид симметрии и группа симметрии элементарной ячейки кристалла, и в ряде случаев рассчитывались вероятные значения параметров такой ячейки.

3. Удалось показать, что явление полиморфизма кристаллов может быть объяснено с использованием представлений о существовании атомов и ионов с правым и левым вращением электронов. Было высказано правдоподобное предположение о том, что арагонит имеет неорганическое, а кальцит — органическое происхождение.

4. На ряде примеров было показано, что для кислородных солей симметрия и параметры решетки в кристаллах тесно связаны с конусами анизотропии протонных и метонных фигур в ядре и электронов в оболочках атомов.

Литература

1. *Г. Б. Бокий.* Введение в кристаллохимию. М., Изд-во МГУ, 1954.
2. *Х. Штрунц.* Минералогические таблицы, изд. ГНТИ литературы по горному делу. М., 1962.
3. *А. С. Поваренных.* Кристаллохимическая классификация минеральных видов. Киев, «Наукова думка», 1966.
4. *М. М. Протодьяконов.* Свойства и электронное строение породообразующих минералов. М., «Наука», 1969.
5. *Г. Г. Маленков.* Исследование структурных особенностей воды и некоторых водных систем. М., изд. Ин-та общей и неорганической химии АН СССР, 1966.
6. *N. H. Fletcher.* The chemical physics of ice. Cambridge Univ. Press, 1970.
7. *W. Barclay Kamb, S. K. Datta.* A Proton order of Ice. Acta Krist, 1964, 17.
8. *W. Barklay Kamb.* Crystall structures of the high-pressures forms of ice.— Nature, 1960, v. 187, 9.
9. Минералы. Справочник, т. II, вып. 2. Простые окислы. М., «Наука», 1965.
10. *У. А. Дир, Р. А. Хауи, Дж. Зусман.* Породообразующие минералы, т. IV. М., «Мир», 1966.
11. *А. Г. Бетехтин.* Курс минералогии. М., Госгеолиздат, 1966.
12. *И. Костов.* Минералогия. М., «Мир», 1971.
13. *Г. Б. Бокий.* Кристаллохимия. М., «Наука», 1971.

РЕЗЮМЕ

Обобщая все изложенное в этом разделе по вопросу об электронном строении кристаллов, необходимо отметить следующее.

1. Симметрия ядер атомов, электронных остовов атомов и электронных оболочек атомов в кристаллах, симметрия кристаллических решеток, а также симметрия внешних форм кристаллов самосогласованы между собой. В большинстве случаев эти симметрии относятся к кубической и гексагональной сингониям. Они характеризуются набором осей симметрии $3L^44L^36L^2$ для кубической сингонии и L^33L^2 — для гексагональной. Для вариантов кубической сингонии часть этих осей может отсутствовать.

Симметрия ядер определяется числом протонов и метонов для наиболее устойчивых изотопов элементов. Оси конусов анизотропии протонов и метонов располагаются параллельно указанным осям симметрии ядер. На расстояниях порядка размеров атомов и выше конусы анизотропии отдельных протонов и метонов практически сливаются.

Для электронных остовов атомов характерно строение оболочек инертных газов в виде торотетраэдров или дитетраэдров — из двухэлектронных и одноэлектронных тороидов. Кроме того, в ряде случаев симметричные остовы атомов имеют тетраэдрические (кремнийобразные), октаэдрические (хромообразные) и комбинированные (никельобразные) электронные подоболочки из одноэлектронных тороидов. Эти оболочки соответствуют различным видам гибридизированных волновых функций. Наряду с торотетраэдрической неонообразной электронной оболочкой возможна и тригональная неонообразная.

Для этих симметричных электронных оболочек и подоболочек также характерно сочетание осей симметрии $3L^44L^36L^2$ и L^33L^2.

Для атомов с незамкнутыми электронными оболочками симметрия обычно понижается за счет внешних электронов. При объединении в кристаллы симметрия электронных оболочек атомов снова повышается и согласуется с симметрией их ядер.

2. Для описания симметрии элементарных частиц, ядер атомов, их электронных остовов, электронных оболочек атомов в кристаллах и самих кристаллических решеток одних только федоровских и даже шубниковских групп недостаточно. Требуется обобщение понятий теории групп на объекты, имеющие статистическую симметрию.

Федоровские группы, как известно, характеризуют симметричное расположение геометрических точек. Шубниковские группы рассматривают симметричное расположение в пространстве некоего асимметричного тетраэдра и учитывают различие между положительным и отрицательным, между правым и левым.

Точки и тетраэдры отличаются статичностью и геометрической точностью.

Нами предлагается оценивать статистическую симметрию динамических объектов.

Так, обычный качающийся физический маятник характеризуется одной плоскостью симметрии, в которой он колеблется, и перпендикулярной к ней вертикальной плоскостью, относительно которой он совершает симметричные колебания. В каждый отдельный момент времени этой симметрии не существует; она появляется только тогда, когда колебания рассматриваются за длительное время.

Аналогично элементарная частица во втором подпространстве за длительный период времени имеет плоскость симметрии, в которой происходит движение ее субчастиц, и перпендикулярную к ней ось вращения бесконечного порядка.

Прецессирующая элементарная частица характеризуется конусом анизотропии, для которого элементами симметрии являются ось прецессии бесконечного порядка и перпендикулярная к ней экваториальная плоскость. Напряженность электрического поля вокруг такой частицы колеблется во времени за один оборот прецессии на много порядков, и поэтому сам конус прецессии носит статистический характер.

Гибридизированные электронные оболочки — также статистические объекты. Их оси и плоскости симметрии относятся не к отдельным мгновенным положениям электронов, а к распределению вероятности их пребывания в различных точках пространства относительно этих элементов симметрии электронной оболочки в целом за большой промежуток времени.

При рассмотрении механических и магнитных моментов мы тоже пользуемся статистическими понятиями, заменяя движущийся по окружности точечный заряд непрерывным круговым током. При прецессии момента сохраняется только проекция его на эту ось за все время движения заряда, а перпендикулярная к ней проекция, лежащая в экваториальной плоскости, не рассматривается, так как в среднем она равна нулю. Это объясняется тем, что, имея в каждый момент времени конечную величину, она непрерывно меняет свое направление в этой плоскости и каждому ее положению через пол-оборота будет соответствовать противоположное, что и дает за большой промежуток времени статистический нуль.

Используемые нами электронные тороиды также носят статистический характер. Они описывают приблизительную форму граничной поверхно-

сти электронного облака вероятности, внутри которого электрон пребывает основную часть времени своего движения. Статистика здесь возникает вследствие анизотропии и осцилляции поля прецессирующих частиц ядра во втором подпространстве и квантовых флуктуаций.

Узлы кристаллической решетки в кристаллах минералов следует рассматривать как статистические понятия, так как за счет теплового движения и нулевых флуктуаций центры атомов и ионов непрерывно колеблются около этих средних точек.

Мы считаем, что симметрия статистических объектов является наиболее общим случаем симметрии, обладающей особыми групповыми свойствами. Шубниковские и федоровские группы симметрии—частные случаи этих групп, опускающие подвижность и статистический характер изучаемых объектов.

3. Равновероятны два основных случая движения электронов в тороидах — по часовой стрелке и против нее, если смотреть на них вдоль оси симметрии на центр атома (правые и левые атомы). Существование правых и левых атомов тесно связано с наличием правых и левых молекул, правых и левых кристаллов и двойников.

   В ряде случаев кристаллы, состоящие из правых и левых атомов, будут давать полиморфные модификации, отличающиеся от кристаллов, состоящих только из правых или только из левых атомов (например, арагонит и кальцит).

4. Наличие конусов анизотропии прецессирующих элементарных частиц является определяющим для образования кристаллических структур. Показано, что в основных кристаллических структурах — кубических гране- и объемно-центрированных, гексагональных плотнейших упаковках и в ряде других случаев конусы анизотропии проходят через узловые точки смежных элементарных ячеек. Узловые точки — места пересечения нескольких конусов анизотропии.

   Для кристаллов тангенсы углов между осями симметрии и направлениями между узловыми точками близлежащих элементарных ячеек для ряда основных и наиболее часто встречающихся решеток описываются формулами $\operatorname{tg}\gamma = 2\sqrt{2}/n$, где n натуральный ряд целых чисел.

   Установлено, что для электронных и метонных конусов анизотропии справедливы выражения $\operatorname{tg}\gamma = 2\sqrt{2}/7$, а для протонных конусов анизотропии $\operatorname{tg}\gamma = 2\sqrt{2}/9$. Эти углы с большой точностью соответствуют углам конусов анизотропии, **независимо вычисленным** для элементарных частиц на основе теории фундаментального поля (ТФП).

   Использование пересечения конусов анизотропии позволило в ряде случаев рассчитать относительные параметры элементарных ячеек и координаты атомов в общих положениях, практически совпадающие с экспериментальными данными, чего не представлялось возможным сделать на основе прежних теорий.

   Предлагается использовать метод пересечения конусов анизотропии для систематического исследования всех существующих и возможных кристаллических структур.

5. При кристаллизации симметричные остовы атомов (ионы) могут соединяться между собой несколькими способами: а) непосредственно, так, чтобы элементы их симметрии были продолжением один другого (ионная и координационная связи); б) через электроны проводимости, попадающие

в тетраэдрические и октаэдрические, а также другие пустоты на пересечении осей симметрии нескольких соседних ионов, играющие роль своеобразных микроанионов; в) с использованием электронов одних атомов без их отрыва от остова для заполнения электронной оболочки другого атома.

6. Магнитные моменты симметричных остовов атомов имеют геометрическую сумму, равную нулю. Ферромагнетизм кристалла получается либо из-за неравенства нулю этой суммы для электронов проводимости (например, в α-железе) или вследствие появления асимметрии остовов атомов (например, Fe^{3+} в пирротине).
7. В случае дефектных упаковок (например, в пирротинах) вакантные места атомов будут стремиться к распределению в общей симметричной упаковке наиболее симметричным образом. Такую же тенденцию будут иметь магнитные остовы атомов как в отношении центров их ядер, так и по направлениям суммарных моментов в пространстве. Это будет приводить к появлению магнитной сверхструктуры.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В основу данной работы положена единая релятивистская квантовая Теория Фундаментального Поля (ТФП). В ней реализовано триединство Пространства — Времени — Вещества. Единое фундаментальное поле ответственно за сильные, электромагнитные, слабые и гравитационные взаимодействия. Определена физическая сущность и вычислены константы этих взаимодействий. Установлено, что основной вклад в триединство вносят Элементарные Частицы (ЭЧ) и Элементарные Частицы Вакуума (ЭЧВ). Выясняется, что их полное описание возможно только в трех дополнительных одно к другому подпространствах с учетом влияния физического вакуума. Показывается, что квантовые свойства микромира являются следствием принципиальной неполноты описания микрообъектов в одном подпространстве, а не особенностями методов их измерения. Это позволило ликвидировать искусственно возведенную пропасть между квантовым и классическим рассмотрением микрообъектов. Оказалось, что в одном подпространстве допустимо классическое и квазиклассическое описание микрообъектов. Конечно, описание это может охватывать только часть свойств (нет полноты) и не может быть точным.

В соответствии с ТФП рассмотрены найденные в теории и взаимосогласованные модели ЭЧ и ЭЧВ, «кристаллическая модель» ядер атомов, модели электронных оболочек атомов, молекул и кристаллов.

Для ЭЧ найдены способы расчета всех основных параметров: масс, зарядов, спинов, магнитных моментов и др. Приведены расчетные формулы и — впервые — каталог рассчитанных параметров элементарных частиц как известных, так и еще не обнаруженных.

Из ТФП вытекает представление о резкой анизотропии поля элементарных частиц, составляющих ядро и электронную оболочку атомов. Напряженность поля на поверхности конусов анизотропии (конусов прецессии) на много порядков больше, чем на их оси или в экваториальной плоскости. Вследствие этого ЭЧ в ядре располагаются не произвольно, а симметрично. От ядра в окружающее пространство направлены конусы анизотропии, направления осей которых соответствуют кубической и гексагональной сингониям.

Электронные оболочки атомов, ранее полученные на основе соображений симметрии и принципа минимальной экранировки, описываются гибридизированными волновыми функциями, как соответствующие решения уравнения Шредингера. Они дают формы электронных оболочек инертных газов и симметричных подоболочек из двух- и одноэлектронных тороидов в виде торотетраэдров, двойных тетраэдров в комбинации с октаэдрами. Расположение осей симметрии этих оболочек самосогласовано с расположением осей симметрии в ядрах атомов. Периодизация атомов, полученная на основе

таких представлений, совпадает с периодизацией системы Менделеева. Полученные этим путем формы электронных оболочек молекул совпадают с эмпирическими данными. Заложены основы Теории Анизотропных Оболочек (ТАО).

Рассчитаны и рационально объяснены строение и физические свойства ряда кристаллов, вычислены параметры кристаллических решеток и координаты атомов не на элементах симметрии, а в общих положениях, чего не удавалось до сих пор сделать.

Основным выводом теории является установление самосогласованности симметрии элементарных частиц, ядер атомов их электронных оболочек, кристаллических решеток.

Кроме того, развито представление о новом виде статистической симметрии, более общей, чем федоровская и шубниковская симметрии.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие 3

I. ЭЛЕМЕНТАРНЫЕ ЧАСТИЦЫ И ИХ РОЛЬ В ФОРМИРОВАНИИ СТРУКТУРЫ АТОМОВ 5

Глава 1. Состояние вопроса 5
Глава 2. Основы теории 9
Глава 3. Структура и параметры частиц 17
Глава 4. Расчет параметров частиц 49
Глава 5. Внутренняя самосогласованность теории 67
Глава 6. Принцип соответствия в ТФП 76
Резюме 116

II. ПЕРИОДИЧЕСКАЯ СИСТЕМА ЭЛЕМЕНТОВ 119

Глава 1. Состояние вопроса 119
Глава 2. Строение и симметрия ядер атомов 126
Глава 3. Периодическая система элементов Менделеева и электронное строение атомов 151
Глава 4. Потенциалы ионизации атомов 164
Резюме 205

III. СТРОЕНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ ОБОЛОЧЕК АТОМОВ 207

Глава 1. Формы гибридизированных электронных оболочек 208
Глава 2. Механические и магнитные моменты электронов в атомах 229
Глава 3. Формы электронных оболочек атомов 238
Резюме 270

IV. СТРОЕНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ ОБОЛОЧЕК МОЛЕКУЛ 273

Резюме 276

V. СТРОЕНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ ОБОЛОЧЕК В КРИСТАЛЛАХ 279

Глава 1. Состояние вопроса 279
Глава 2. Строение электронных оболочек в кристаллах элементов 286
Глава 3. Строение электронных оболочек в кристаллах минералов 319
Резюме 351

ЗАКЛЮЧЕНИЕ 355

Михаил Михайлович Протодьяконов
Илья Львович Герловин

**ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ
И ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ**

Утверждено к печати
ордена Ленина Институтом физики Земли
им. О. Ю. Шмидта
Академии наук СССР
(Сектор физико-технических горных проблем)

Редактор издательства
Т. А. Мумриенко

Художник
Н. Н. Власик

Художественный редактор
А. Н. Жданов

Технические редакторы
Т. В. Полякова, О. М. Гуськова

Сдано в набор 17/II 1975 г.
Подписано к печати 20/X 1975 г.
Формат 70×100¹/₁₆. Усл. печ. л. 29,69
Уч.-изд. л. 29,6. Тираж 1900 экз.
Т-16355 Тип. зак. 1889. Бумага люксоарт
Цена 2 р. 88 к.

Издательство «Наука», 103717 ГСП,
Москва, К-62, Подсосенский пер., 21

2-я типография издательства «Наука», 121099,
Москва, Г-99, Шубинский пер., 10

Исправления и опечатки

Страница	Строка	Напечатано	Должно быть
20	3 сн.	Учитываться при $v_r \neq 0$	Учитываться в собственной системе координат
20	1 сн.	ЭЧВ, в собственной системе координат	ЭЧВ.
21	10 св.	когда при	при
58	3 сн.	(при $I=0$)	(при $J=0$)
59	9 св.		
71	Ф-ла (343)	q_1^3	q_1^2
76–77	Вклейка (табл. 7) графа 6С	$=(1-\beta_1)$	$=(1-\beta)$
78	Ф-ла (366)	$1-\frac{}{K_{1p}}$	$1-\frac{2\pi K_{pi}}{K_{1p_i}}$
112	Табл. 9, гр. 5, 14 сн.	6883,68	6983,68
132	1 сн.	$X_1 0 Y_1$	$X_1 0 Z_1$
136	6 св.	62	162
191	15 св.	$(N-1-b)$	$(N-1-b)^2$
194	Табл 19, в гр. 4 Be	9,922	9,322
194	То же, в гр. 17 C	114,139	114,193
198, 199	Таблица 21, головка	10^{-4}; 10^{-5}; 10^{-10}	10^4; 10^5; 10^{10}
213	Ф-ла (7)	$=\sin\theta\sin\varphi$	$=\sigma\sin\theta\sin\varphi$
215	11 сн.	$2sp^2$	$2sp^3$
215	Ф-ла (19)	$++\int_0^\pi$	$\int_0^\pi$

М. М. Протодьяконов и И. Л. Герловин